

REACH Praxisführer zur Expositionsbewertung und zur Kommunikation in den Lieferketten
Teil IV: Vertiefungskapitel Expositionsabschätzung





Juni 2010

Wichtige Hinweise für den Leser

Dieses Dokument wurde von einer Arbeitsgruppe des VCI erstellt als Teil des gemeinsamen VCI/CEFIC-Projektes, Instrumente und Leitfäden für die Industrie zu entwickeln. Es bezieht sich auf Stoffsicherheitsbeurteilungen, Stoffsicherheitsberichte und Expositionsszenarien.

Das vorliegende Dokument ist Teil IV des REACH Praxisführers zur Expositionsbeurteilung und zur Kommunikation in den Lieferketten. Es beschreibt den Stand der Entwicklungen zum 1. Quartal 2010. Viele dieser Themen sind weiterhin in der Entwicklung, sowohl innerhalb der Industrie als auch bei der Europäischen Chemikalienagentur ECHA. Dieser Leitfaden ist daher nicht als abgeschlossen zu betrachten, sondern gibt einen Überblick über den aktuellen Stand.

Der Praxisführer besteht aus mehreren Teilen. Eine Übersicht finden Sie im Vorwort zu Teil I.

Eine Beschreibung von Gliederung und Inhalten des Praxisführers steht auf der folgenden Internetseite zur Verfügung:

VCI: http://www.vci.de/default~cmd~shd~docnr~125022~lastDokNr~102474.htm

Alle zugehörigen Materialien können von dieser Seite heruntergeladen werden. Sie finden hier zusätzlich Hinweise zu verwandten Themen und neuen Entwicklungen.

Die englischsprachigen Veröffentlichungen zum Praxisführer finden Sie auf der folgenden Internet-Seite:

CEFIC: http://cefic.org/templates/shwPublications.asp?HID=750

REACH Praxisführer zur Expositionsbewertung und zur Kommunikation in den Lieferketten

Teil IV: Vertiefungskapitel Expositionsabschätzung

Inhaltsverzeichnis

1 Expositionsabschätzung am Arbeitsplatz

1.1 Ziele, Grundlagen und wesentliche Parameter der Expositionsabschätzung und Risikobeschreibung am Arbeitsplatz

Diese Einleitung beschreibt einige der Grundlagen der Expositionsabschätzung und Risikobeschreibung am Arbeitsplatz (z.B. Expositionspfade und expositionsbestimmende Größen), während sich die folgenden Kapitel spezifischeren Themen (z.B. der Anwendung und Bewertung von Instrumenten zur Expositionsabschätzung) zuwenden.

1.1.1 Expositionspfade

Die Exposition am Arbeitsplatz erfolgt hauptsächlich durch Inhalation (Einatmen) und dermalen Kontakt (d.h. Aufnahme über die Haut). Die Inhalation kann auf unterschiedliche Weise erfolgen: beispielsweise können Feststoffe als Stäube in die Luft gelangen, während eine flüchtige Flüssigkeit verdampfen kann und somit eine Exposition gegenüber einem Gas resultiert. Die Eigenschaften eines Stoffes (z.B. das Staubungsverhalten im Falle von Feststoffen und der Dampfdruck im Falle von Flüssigkeiten) sind daher entscheidende Parameter für die Expositionsabschätzung und werden dem entsprechend in aller Regel bei der Anwendung der verschiedenen Instrumente zur Expositionsabschätzung (s.u.), benötigt.

Wenngleich die dermale Exposition oftmals vernachlässigt wird, kann sie in einigen Fällen sogar bedeutender sein als die inhalative Exposition. Die dermale Exposition wird entweder als <u>potentielle dermale Exposition</u> (d.h. die Stoffmenge auf der Oberfläche der (Schutz-) Kleidung sowie der exponierten Hautoberfläche) oder als <u>tatsächliche dermale Exposition</u> (d.h. die Stoffmenge auf der Haut, die für eine Aufnahme in den Körper zur Verfügung steht) gemessen.

Für Stoffe, die vor allem lokale Effekte, wie beispielsweise Haut- oder Augenreizungen, Verätzungen oder Hautsensibilisierungen, verursachen, kann es schwierig sein, diese Effekte zu quantifizieren und DNELs für diese Endpunkte abzuleiten. In diesen Fällen ist eine quantitative Abschätzung der dermalen Exposition möglicherweise wenig sinnvoll und eine qualitative Risikobeschreibung zur Auswahl geeigneter Risikomanagement-Maßnahmen sollte an ihre Stelle treten. Beispielsweise werden bei der Handhabung ätzender Stoffe mit Sicherheit Schutzhandschuhe getragen, so dass die Exposition minimiert wird. Eine quantitative Expositionsabschätzung wird dann nicht benötigt.

In anderen Fällen kann eine dermale Exposition aufgrund der Anwendungsbedingungen ausgeschlossen werden. Wenn beispielsweise aufgrund der Prozesstemperatur bei Hautkontakt mit der Anlage unmittelbar Verbrennungen resultieren würden, kann vernünftigerweise ange-

nommen werden, dass keine dermale Exposition gegenüber den in dieser Anlage verarbeiteten Stoffen erfolgt.

Im Gegensatz zum Verbraucherbereich spielt die orale Exposition (Verschlucken des Stoffes) an nahezu allen Arbeitsplätzen eine untergeordnete Rolle und wird im Folgenden nicht weiter diskutiert. Wenngleich eine orale Exposition vorkommen kann, beispielsweise durch Mundkontakt mit verschmutzter Arbeitskleidung, wird sie im Allgemeinen durch einfache Regeln der Arbeitshygiene (z.B. abgetrennte Bereiche zum Essen und Trinken, Waschräume usw., wie in der „Technischen Regel für Gefahrstoffe 500: Schutzmaßnahmen“ (TRGS 500) niedergelegt) begrenzt. Es wird hier davon ausgegangen, dass solche Maßnahmen üblicherweise auf der Grundlage nationaler Arbeitsschutzgesetze umgesetzt sind.

Die Expositionsabschätzung führt für gewöhnlich zu einem Wert für die äußere Exposition:

- Inhalative Exposition: Konzentration des Stoffes in der Luft (in mg/m^3 oder ppm, üblicherweise 8 Stunden-Schichtmittelwerte)
- Dermale Exposition: Stoffmenge auf der Kleidung und den exponierten Hautflächen (d.h. potentielle dermale Exposition; Messwerte zur tatsächlichen dermalen Exposition mögen in einigen wenigen Fällen zur Verfügung stehen). Die Maßeinheit für die Exposition kann variieren, z.B. $µg/cm^2$ x h oder mg/d.

Es ist einleuchtend, dass das Ergebnis der Expositionsabschätzung nicht nur von den Eigenschaften des Stoffes, sondern auch von den Anwendungsbedingungen und den etablierten Risikomanagement-Maßnahmen (RMM) abhängen wird. Diese Aspekte werden weiter unten bei der Diskussion der Instrumente zur Expositionsabschätzung behandelt.

1.1.2 Ansätze zur Expositionsabschätzung

Üblicherweise sollten für Gefahrstoffe relevante Angaben zur Expositionssituation und zu geeigneten Risikomanagement-Maßnahmen aus der Risikobewertung nach Richtlinie 98/24/EG des Rates (“Chemicals Agents Directive”, CAD) vorliegen (und für Registrierungszwecke verwendet werden). In vielen Fällen mögen gemessene Expositionsdaten (z.B. die Konzentration einer Chemikalie in der Arbeitsplatzatmosphäre) vorliegen. Diese können unter der Voraussetzung verwendet werden, dass sie das betrachtete Expositionsszenario (ES) adäquat abbilden und einige Qualitätskriterien erfüllen (s. Kapitel 1.2.1).

Für Stoffe ohne Arbeitsplatzgrenzwerte sind Messwerte allerdings oftmals nicht verfügbar oder existieren nur für eine spezifische Anwendung. Wenn Arbeitsplatzmesswerte fehlen, muss die Exposition abgeschätzt werden. Die für diesen Zweck verfügbaren Instrumente folgen in der Regel einem gestuften Ansatz. Das Ausmaß der Differenzierung – und somit die Anforderungen an einzugebende Parameter – nimmt von Instrumenten der unteren Stufe 1 zu Instrumenten höherer Stufen zu. Dieser Stufenansatz stellt sicher, dass detaillierte und arbeitsintensive Bewertungen nicht für Situationen durchgeführt werden, in denen eine vernachlässigbare Exposition zu erwarten ist.

Bei der Expositionsabschätzung ist eine adäquate Dokumentation aller eingegebenen Werte sowie die Angabe von Quellen für die Eingangsdaten wichtig. Einige der weiter unten diskutierten Instrumente erlauben die Erstellung von Berichten, während andere nur sehr begrenzte Möglichkeiten der Dokumentation aufweisen. Druckbildschirme („print screen"-Befehl) können dann die einzige zur Verfügung stehende Möglichkeit zur Dokumentation sein.

Es ist zu beachten, dass einige der Instrumente zur Expositionsabschätzung, wie das ECETOC TRA-Modell, bereits einen risikobasierten Ansatz beinhalten, indem die Expositionsabschätzung mit Daten zur Gefährdung verglichen wird.

REACH verlangt die Expositionsabschätzung unter Berücksichtigung aller Anwendungsbedingungen innerhalb eines Expositionsszenarios, einschließlich der Risikomanagement-Maßnahmen. Die in den folgenden Kapiteln beschriebenen Modelle zur Expositionsabschätzung erlauben in unterschiedlichem Maße eine Berücksichtigung der Expositionsminderung aufgrund von Risikomanagement-Maßnahmen. Dieser Aspekt wird weiter unten im Zusammenhang mit dem jeweiligen Modell diskutiert.

1.1.3 Expositionsbestimmende Größen

Bestimmte Schlüsselinformationen, die sogenannten expositionsbestimmenden Größen, wurden bereits im Zusammenhang der Entwicklung des ES diskutiert (Kapitel 6 (Teil I) und 9.3 (Teil II) des Praxisführers; s. auch ECHA CSA 2008, Teil D, Kapitel 2.2). Diese, wie die stoffspezifischen Eigenschaften, Anwendungsbedingungen und Risikomanagement-Maßnahmen, sind für die Expositionsabschätzung sehr wichtig. Beispielsweise hat der Dampfdruck eines flüssigen Stoffes einen entscheidenden Einfluss auf die Konzentration dieses Stoffes in der Luft und somit auf die inhalative Exposition. In Bezug auf die Anwendungsbedingungen kann eine höhere Prozesstemperatur die inhalative Exposition vergrößern, die jedoch durch Risikomanagement-Maßnahmen, wie eine örtliche Absaugung, beherrscht werden kann.

Für die meisten expositionsbestimmenden Größen dürften spezifische Informationen zur Verfügung stehen. Allerdings benötigen Abschätzungen der Stufe 1 üblicherweise nur sehr grundlegende Informationen und wenn eine Abschätzung nach Stufe 1 kein Risiko ausweist (d.h. eine Abschätzung nach höherer Stufe nicht erforderlich ist), werden diese spezifischen Informationen nicht benötigt.

Die für Abschätzungen der Stufe 1 und Abschätzungen höherer Stufe erforderlichen Parameter sind in Anhang 4.1-3 bzw. Anhang 4.1-4 aufgeführt. Diese geben auch Hinweise auf Quellen für die relevanten Daten.

1.2 Wie wird die berufliche Exposition abgeschätzt?

Prinzipiell kann die Exposition auf Basis gemessener Daten oder auf Basis von Daten bewertet werden, die mit einem der unten beschriebenen Instrumente berechnet wurden (modellierte Schätzungen). ECHA CSA 2008 (Kapitel R.14.4.1) schlägt die folgende Hierarchie vor:

1. Messdaten für den Stoff selbst
2. Messdaten für ähnliche/stellvertretende Stoffe/Tätigkeiten
3. modellierte Schätzungen

Während aus dieser Hierarchie eindeutig hervorgeht, dass modellierte Daten nur als letzte Möglichkeit anzusehen sind (es existiert bislang kein vollständig validiertes Expositionsmodell), sind Messdaten nicht *per se* vorzuziehen, sondern müssen bestimmte Kriterien erfüllen. Beispielsweise sollten Messdaten für das Expositionsszenario/die Expositionsszenarien des jeweiligen Stoffes repräsentativ, aussagekräftig aufgrund des Probenumfangs und verlässlich sein. Vor diesem Hintergrund werden viele Messdaten eines oder mehrere dieser Kriterien nicht erfüllen. Auch Daten von ähnlichen/stellvertretenden Stoffen könnten unzureichend sein. Wenn Messdaten niedrigerer Qualität zur Verfügung stehen, werden diese zusammen mit den Ergebnissen aus der Anwendung von Modellen zur Expositionsabschätzung (modellierten Daten) genutzt. Die Plausibilität der aus Messungen resultierenden Daten und der Modellschätzungen muss diskutiert werden, was zu dem schlussendlichen Schätzwert führt.

Daneben sind einige allgemeine Prinzipien zu berücksichtigen:

- Die Bewertung sollte transparent und klar sein.
- Die Bewertung sollte konservativer Natur sein, d.h. auf der sicheren Seite liegen, und sollte für alle Tätigkeiten und Expositionspfade innerhalb des ES, die zur Exposition beitragen durchgeführt werden. Eine aus Unfällen, bewusster Fehlanwendung oder Fehlfunktion resultierende Exposition sollte allerdings nicht abgedeckt werden.[1] Ferner sollten extreme Schätzungen vermieden werden, wie sie aus der Verknüpfung mehrerer maximaler Annahmen resultieren.
- Untergruppen oder spezielle Populationen, die sich in der Expositionsintensität oder Empfindlichkeit unterscheiden (wie z.B. Frauen im gebärfähigen Alter und Schwangere), sollten berücksichtigt werden.

Diese und zahlreiche andere, in ECHA CSA 2008 (Kapitel R.14) genannte allgemeine Prinzipien, wie die Berücksichtigung von RMM, sind nicht notwendigerweise auf alle Bewertungen anwendbar. Beispielsweise sind Modelle der Stufe 1 bereits konservativ, so dass dieses Prinzip nicht zusätzlich beachtet werden muss.

---

[1] Richtlinie 98/24/EG des Rates „zum Schutz von Gesundheit und Sicherheit der Arbeitnehmer vor der Gefährdung durch chemische Arbeitsstoffe bei der Arbeit“ behandelt (teilweise) diese Situationen.

1.2.1 Verwendung von Messdaten

Grundsätzlich gibt es zwei Arten von Messdaten:

- Messdaten für den Stoff selbst
- Messdaten für ähnliche/stellvertretende Stoffe

Diese unterschiedlichen Arten von Daten sind in der folgenden Matrix beschrieben. Es ist zu beachten, dass die Verwendung von Daten für ähnliche Stoffe, die in ähnlichen Tätigkeiten verwendet werden, zwei Extrapolationsschritte beinhaltet und somit mit angemessener Sorgfalt durchgeführt werden sollte. Die Gründe für die Verwendung solcher Daten müssen gut erläutert und dokumentiert werden.

	Eigentlicher Stoff	**Ähnlicher Stoff**
Eigentliches Expositionsszenario	Eigentliche Messdaten	Ähnliche/stellvertretende Daten
Ähnliches Expositions-szenario	Ähnliche/stellvertretende Daten	Ähnliche/stellvertretende Daten

Ein ähnlicher Stoff ist durch bezüglich der Expositionsrelevanz ähnliche physikalisch-chemische Eigenschaften definiert (z.B. Dampfdruck, Staubungsverhalten). Um auf der sicheren Seite zu liegen, ist ein „kritischerer“ Stoff für ähnliche/stellvertretende Daten zu verwenden. Beispielsweise kann die Verwendung von Daten für Toluol in einem Xylol-Expositionsszenario geeignet sein, weil Toluol flüchtiger ist als Xylol und somit zu einer konservativen Expositionsabschätzung führt.

Ein ähnliches Expositionsszenario beinhaltet eine Tätigkeit mit ähnlichen Anwendungsbedingungen und Risikomanagement-Maßnahmen, so dass mit hoher Wahrscheinlichkeit eine verlässliche Expositionsabschätzung für das zu bewertende Szenario ermöglicht wird.

Grundsätzlich sollten die für einen Soff selbst vorliegenden Messdaten genutzt werden. Qualitativ hochwertige Daten von ähnlichen/stellvertretenden Stoffen sind jedoch häufig besser als Daten schlechter Qualität für den Stoff selbst.

1.2.2 Quellen für Messdaten

Messdaten können aus einer Vielzahl von unterschiedlichen Quellen stammen, wie z.B.:

- Betriebsinterne Daten
- Datenbanken (soweit öffentlich zugänglich)
- Erhebungen, beispielsweise durch Branchen - oder ähnliche Organisationen

- Öffentlich zugängliche Daten (z.B. Übersichtsarbeiten, Literaturdaten)

Anhang 4.1-1 gibt Beispiele für öffentlich zugängliche Quellen mit Messdaten. Außerdem wird im Kapitel 8.3 (Teil I) des Praxisführers die Verwendung existierender Daten näher beschrieben (z.B. der MEGA-Datenbank).

1.2.3 Kriterien und Auswahl geeigneter Messdaten

1.2.3.1 Inhalative Exposition

Wie bereits oben erwähnt, müssen Messdaten einige Qualitätskriterien erfüllen, um repräsentativ, aussagekräftig und verlässlich zu sein. ECHA CSA 2008 (Kapitel R.14.4.5) führt mehrere Kriterien auf, von denen die folgenden die wichtigsten zur Sicherstellung einer ausreichenden Qualität von Messdaten sind:

- Höhe und Einheit der Messwerte angegeben
- Große Probenanzahl
- Repräsentativität der Daten für das betrachtete ES (insbesondere Anwendungsbedingungen und Risikomanagement-Maßnahmen)
- Personenbezogene Probenahme (Atemzone) ist einer statischen Probenahme vorzuziehen

Allgemein sind Messungen vorzuziehen, die unter Verwendung anerkannter und standardisierter Protokolle für Probenahme und Analytik erfolgten. Wenn dem Konzept homogener Expositionsgruppen (HEG) gemäß der Europäischen Norm EN 689 bei der Planung von Arbeitsplatzmessungen gefolgt wurde, dürfte dies insbesondere die Beurteilung, ob die Daten repräsentativ sind erleichtern (HEG sind Gruppen von Arbeitern, die ähnlich exponiert sind).

1.2.3.2 Dermale Exposition

Allgemein liegen für die dermale Exposition deutlich weniger Daten vor als für die inhalative Exposition. ECHA CSA 2008 (Kapitel R.14.4.5) tendiert daher dazu, Daten zur dermalen Exposition zu verwenden, ohne die gleichen strikten Qualitätskriterien wie bei der Inhalation anzulegen. Die folgende Liste führt wiederum einige Kriterien zur Wahrung einer ausreichenden Qualität auf.

- Höhe und Einheit der Messwerte (z.B. Stoffmenge pro Flächeneinheit, einschließlich Rahmenbedingungen der Messung wie Größe der beprobten Oberfläche, Stoffmenge und Dauer der Probenahme)
- Große Probenanzahl
- Repräsentativität der Daten für das betrachtete ES (insbesondere Anwendungsbedingungen und Risikomanagement-Maßnahmen)

- Es muss eindeutig angegeben sein, ob die Daten eine Exposition gegenüber dem Stoff oder gegenüber dem verwendeten Gemisch abbilden

Es gibt viele verschiedene Maßeinheiten, um die dermale Exposition anzugeben (z.B. mg/Person, mg/cm^2 Haut oder mg/cm^2 x h). Wenn der DNEL eine andere Einheit hat als der Wert für die Exposition, kann letzterer in die Einheit des DNELs umgerechnet werden.

Zusätzlich zu ECHA CSA 2008 bieten mehrere andere Dokumente, wie die deutsche TRGS 401 (Hautkontakt) und 402 (Inhalation)[2], wichtige Informationen zur Sicherstellung einer guten Qualität von Messdaten.

Diskussion der Eignung/Verwendbarkeit

Zur Differenzierung der Unterschiede in der Qualität von Messdaten werden die drei folgenden Qualitätsgrade eingeführt:

- Hohe Qualität
- Mittlere Qualität
- Niedrige Qualität

Die nachfolgenden Beispiele vermitteln welcher Datenlage welcher Qualitätsgrad zugeordnet werden kann:

- Ein Messwert (z.B. ausgedrückt als Median oder 90. Perzentil), der aus 26 personenbezogenen Messungen unter Bedingungen erhalten wurde, die für das betrachtete ES repräsentativ sind, wird sehr wahrscheinlich in die Expositionsabschätzung als Wert mit hoher Qualität eingehen. Ein solcher Wert kann z.B. in branchenspezifischen Messberichten oder in einem EU „Risk Assessment Report“ angegeben sein.
- Ein Mittelwert aus drei personenbezogenen Messungen für das betrachtete ES (z.B. aus der Originalliteratur) ist für die Expositionsabschätzung wahrscheinlich von mittlerer Qualität.
- Ein nur als Mittel angegebener Wert, für den keine Angaben zur Anzahl der Messungen und Details zur Probenahme vorliegen, ist sehr wahrscheinlich von niedriger Qualität. Dies trifft insbesondere zu, wenn er für die im betrachteten ES beschriebene Tätigkeit nicht vollständig repräsentativ ist. Diese Art der Datenpräsentation ist in Übersichtsarbeiten (z.B. der „Environmental Health Criteria“-Serie der Weltgesundheitsorganisation) üblich.

Diese Kriterien können sowohl auf Messdaten für den eigentlichen Stoff im betrachteten ES als auch auf ähnliche/stellvertretende Daten angewendet werden. Prinzipiell kann ein Wert

---

[2] Bundesanstalt für Arbeitsschutz und Arbeitsmedizin: Technische Regeln für Gefahrstoffe (TRGS): Gefährdung durch Hautkontakt – Ermittlung, Beurteilung, Maßnahmen (TRGS 401)
Ermitteln und Beurteilen der Gefährdungen bei Tätigkeiten mit Gefahrstoffen: Inhalative Exposition (TRGS 402), http://www.baua.de

hoher Qualität für den eigentlichen Stoff im betrachteten ES allein verwendet werden. Ein Wert mittlerer Qualität wird sehr wahrscheinlich zusätzliche ähnliche/stellvertretende Daten oder Modellierungen (d.h. die Anwendung von Instrumenten zur Expositionsabschätzung) benötigen. Als allgemeine Regel wird vorgeschlagen, dass umso mehr Ansätze parallel verfolgt werden sollten, je niedriger die Qualität ist. Es kann durchaus sein, dass drei Ansätze verfolgt und die resultierenden Abschätzungen einbezogen werden müssen.

1.2.4 Verwendung von Instrumenten zur Expositionsabschätzung – Stufe 1

Im Folgenden werden Instrumente der Stufe 1 erläutert, wie sie in ECHA CSA 2008 (Kapitel R.14.4.6-R.14.4.8) vorgeschlagen werden. Anhang 4.1-2 enthält eine kurze Übersicht und Quellen für Instrumente der Stufe 1.

Anwender von Instrumenten zur Expositionsabschätzung sollten beachten, dass die meisten Instrumente von sehr konservativer Natur sind (d.h. in den meisten Fällen verwenden sie Annahmen, die zu vorsichtigen Expositionsabschätzungen führen – die tatsächlichen Expositionen sind niedriger als die modellierten) und dass sie nur begrenzt und/oder für einige Verwendungen validiert sind. Insbesondere die Anwendung von Modellen höherer Stufe erfordert in vielen Situationen ein tiefgehendes Verständnis der Expositionsabschätzung und Erfahrung in der Handhabung der Instrumente, um sehr ungenaue Schätzungen zu vermeiden.

1.2.4.1 ECETOC Targeted Risk Assessment (TRA)

Die vollständig überarbeitete Version von ECETOC TRA (siehe Anhang 4.1-2 hinsichtlich Verfügbarkeit und Dokumentation) ermöglicht die Abschätzung der inhalativen und dermalen Exposition am Arbeitsplatz. Verglichen mit der internet-basierten Vorgängerversion ist ECETOC TRA nunmehr als Microsoft Excel®-basiertes Instrument umgesetzt und enthält zahlreiche Veränderungen, die detailliert im begleitenden „Technical Report“ (siehe Anhang 4.1-2) dargestellt werden.

Viele der in der neuen Version umgesetzten Änderungen zielen auf eine bessere Integration in den Prozess der Expositionsabschätzung unter REACH ab (z.B. Einführung der PROCs). Daher ist ECETOC TRA nun mehr ein Instrument der Expositionsabschätzung als (wie zuvor) ein Instrument der zielgerichteten Risikobewertung („targeted risk assessment“, TRA). Es ist nach Eingabe von DNELs oder analoger Werte allerdings immer noch möglich, Risikowerte zu berechnen. Wiederum finden sich weitere Details zum Hintergrund der Veränderungen und zum Anwendungsbereich der neuen Version im „Technical Report“.

Das Instrument wird als bevorzugtes Model der Stufe 1 für die Expositionsabschätzung am Arbeitsplatz angesehen (ECHA CSA 2008, Teil D, Kapitel 5.3).

ECETOC TRA liegt nur in einer englischen Sprachversion vor und besteht aus einzelnen Microsoft Excel®-Dateien für die Bereiche Arbeitsplatz und Verbraucher. Zusätzlich wurde ein integriertes Werkzeug („integrated tool") entwickelt, das neben der Expositionsabschätzung für Arbeiter und Verbraucher auch die Umweltexpositionsabschätzung beinhaltet (Info-Box 1). Benutzerhandbücher sind für alle diese Bestandteile verfügbar. Die folgende Beschreibung basiert auf dem ECETOC TRA-Modul zur Expositionsabschätzung für den Arbeitsplatz.

Info-Box 1

Das integrierte Werkzeug ist komplexer als die einzelnen Werkzeuge (es verwendet 9 einzelne Dateien) und folgt eher den Prinzipien der Vorgängerversion, indem:

- für alle drei Bereiche (Arbeitsplatz, Verbraucher und Umwelt) eine gemeinsame Schnittstelle für Eingabe und Ausgabe bereitgestellt wird,
- es die Daten für verschiedene Substanzen und Verwendungsszenarien in einer Datenbank speichert
- es die Änderung in der Datenbank gespeicherter Daten ermöglicht.

Zusätzlich beinhaltet das neue integrierte ECETOC TRA nun die Möglichkeit zur Stapelverarbeitung mehrerer Substanzen / Szenarien. Dies kann insbesondere als erster screening-Schritt hilfreich sein, um einen vollständigen Überblick zu bekommen.

ECETOC TRA für den Arbeitsplatz besteht aus einer einzigen MS Excel®-Datei und einem begleitenden Benutzerhandbuch. Vor dem Ausführen der Datei empfiehlt es sich, eine Kopie der Datei anzulegen. In Abhängigkeit von den Sicherheitseinstellungen in MS Excel® wird der Anwender beim Öffnen der Datei ggf. zum Zulassen von Makros aufgefordert.

Das ECETOC TRA-Modul für den Arbeitsplatz startet mit einem bereits eingetragenen Beispielstoff (Stoff „demosub1" mit der unechten CAS-Nummer 01-02-03). Dies kann hilfreich sein, um einen ersten Eindruck des Instruments zu erlangen. Allerdings ist es vor der Verwendung des Werkzeugs nützlich, die „Clear All"-Schaltfläche am Ende des Eingabe-Arbeitsblattes („input module") zu betätigen statt zu versuchen, die Daten des Beispielstoffes zu überschreiben.

Es gibt insgesamt neun Arbeitsblätter (im Folgenden werden die englischen Originalbezeichnungen der Arbeitsblätter verwendet):

- „InputModule": dies stellt das zentrale Eingabeblatt dar.
- „Fugacity", "Value look up", "PROC", "Duration of Activity", "RPE", "Mixtures" und „Dermal": diese Arbeitsblätter enthalten alle in den Berechnungen verwendeten Werte, z.B. Faktoren zur Expositionsminderung durch Atemschutz, und geben Begründungen für ihre Auswahl (wenn beispielsweise die neuen Expositionsvorhersagen von ECETOC TRA von dem zugrunde liegenden EASE-Modell oder der Vorgängerversion abweichen); diese Angaben sind hilfreich, um die Berechnungen besser zu verstehen und

auch, um einen Eindruck von dem Einfluss verschiedener Expositionsdeterminanten zu bekommen.

- „Demosub1 (01-02-03)“: dieses Arbeitsblatt enthält das Ergebnis der Expositionsabschätzung (im Instrument als „linear report” („linearer Bericht“) bezeichnet) für den Beispielstoff.

Das Instrument stellt Anwendungshinweise im Eingabe-Arbeitsblatt („InputModule”) bereit, die im Wesentlichen die schrittweise Herangehensweise beschreiben; Kommentare für jeden Parameter befinden sich in den mit einem Fragezeichen markierten Feldern:

- START: Zunächst sind die stoff-spezifischen Daten (Name, CAS-Nummer, Molekularmasse und Daten zur Flüchtigkeit („Likelihood to become airborne“)) einzugeben. Die indikativen Referenzwerte (z.B. ein DNEL oder andere Werte wie Arbeitsplatzgrenzwerte) können eingegeben werden und ECETOC TRA berechnet dann, ob die vorhergesagte Exposition über dem Referenzwert liegt. Der Anwender kann allerdings diese Felder auch leer lassen und allein die Exposition berechnen (siehe allerdings unten diskutierte Grenzen).

  Der Abschnitt zur Flüchtigkeit („likelihood to become airborne”) stellt eine Verknüpfung von Determinanten dar, die in der folgenden Abbildung zusammengefasst sind.

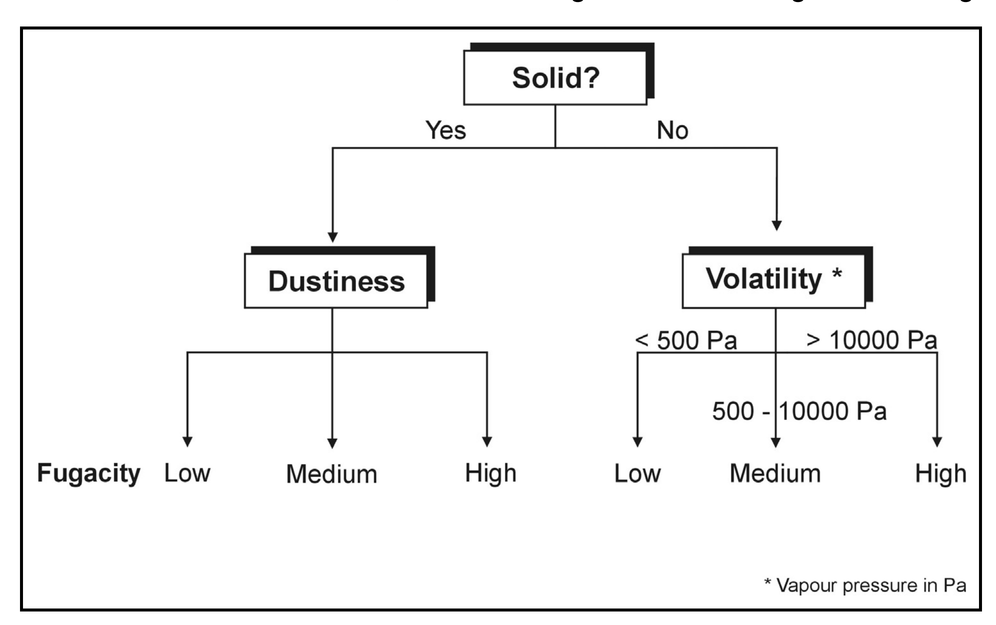


Abbildung 1-1 Schematische Darstellung des Entscheidungsbaums zur Flüchtigkeit (die englischen Bezeichnungen aus ECETOC TRA wurden hier beibehalten)

Die Entscheidungen zur Staubigkeit eines Stoffes beinhaltet ein subjektives Element (siehe auch Diskussion des EMKG-EXPO-TOOL weiter unten). ECETOC TRA für den Arbeitsplatz bietet in dem Arbeitsblatt zur Flüchtigkeit („Fugacity“) eine gewisse Anleitung zur Beurteilung der Staubigkeit (detailliertere Informationen finden sich im „Technical Report“ (ECETOC,

2004, Abschnitt 2.1.1 sowie Appendix C und Addendum (ECETOC 2009)) und Kapitel R.14 (ECHA CSA (2008, Entwurfsfassung 2010). Es muss auch betont werden, dass für flüchtige Stoffe der Dampfdruck bei der Prozesstemperatur ausgewählt werden muss. Daher muss das Instrument mehrmals ausgeführt werden, wenn ein Stoff unter ähnlichen Bedingungen, aber bei verschiedenen Temperaturen gehandhabt wird.

Nach Vervollständigung der oben erwähnten Eingangsdaten („input parameters“: stoffspezifische Daten und Flüchtigkeit) müssen Anwender die Verwendungsbedingungen im Abschnitt “exposure scenario builder” des Eingabeblattes (“InputModule”) spezifizieren. Der Unterschied zwischen den beiden Abschnitten „input parameters“ und „exposure scenario builder“ ist wichtig, da die Eingabedaten („input parameters“) beibehalten und Expositionsabschätzungen für verschiedene Szenarien durchlaufen werden können (s.u.).

Im “exposure scenario builder” sollte ein Name für das Szenario vergeben werden, gefolgt von der Auswahl der geeigneten PROC und Auswahl entweder industrieller oder gewerblicher Tätigkeit (“industrial activity” oder “public domain (professional) activity”; STEP 1 in ECETOC TRA für den Arbeitsplatz). Die Auswahl der korrekten PROCs wird hier nicht behandelt, weil sie schon im Zusammenhang der Entwicklung von Expositionsszenarien (Teil I, Kapitel 9.3.1) beschrieben wurde. Das Instrument weist einigen PROCs automatisch industrielle oder gewerbliche Tätigkeit zu, indem die alternative Auswahl deaktiviert wird. Wenn beispielsweise industrielles Sprühen (PROC 7) ausgewählt wird, ist die Option gewerblicher Tätigkeiten (“public domain (professional) activity”) automatisch deaktiviert.

Der zweite Schritt (STEP 2) im “exposure scenario builder” beinhaltet die Anwendung expositionsmodifizierender Verwendungsbedingungen (“exposure modifiers (operational conditions)“). An diesem Punkt erlaubt ECETOC TRA es dem Anwender etwas mit den Parametern „herumzuspielen“ und den Einfluss dieser Parameter auf die Expositionsabschätzung zu untersuchen („Iteration“). Beispielsweise kann eine Flüssigkeit mit einem Dampfdruck von 1000 Pa (mittlere Flüchtigkeit) folgende extreme Schätzungen für PROC 7 (industrielles Sprühen) ergeben.

Tabelle 1-1 Extreme Schätzungen für einen Stoff mittlerer Flüchtigkeit in PROC 7 (die englischen Bezeichnungen aus ECETOC TRA wurden hier beibehalten)

Parameter	**Exposionsabschätzung**	
	Niedrigste	**Höchste**
Does this activity take place indoors or outdoors?	Outdoors	Indoors
Is Local Exhaust Ventilation present?	N/A	No
What is the Duration of the Activity?	15 minutes	>4 hours
What type of respiratory protection is used?	95% reduction*	No protection
Is the substance used in a Preparation?	Yes	No
Select the concentration range (w/w)	<1%	N/A
Result	0.0875 ppm	250 ppm

** Respiratory protection capable offering a 95% reduction in inhaled concentrations of the substance*

Dieses Beispiel zeigt, dass Expositionsabschätzungen in Abhängigkeit von den gewählten Parametern über einen breiten Bereich variieren können. ECETOC TRA gibt nur für die Dauer der Tätigkeit einen Standardwert (>4 Stunden) an. Für Screening-Zwecke auf Stufe 1 kann es hilfreich sein, mit den konservativsten Annahmen zu beginnen (letzte Spalte in der obigen Tabelle). Wenn mittels dieser Screening-Prozedur die sichere Verwendung gezeigt werden kann, ist eine weitere Verfeinerung nicht nötig. Wenn die sichere Verwendung mit den konservativsten Parametern nicht gezeigt werden kann, können die Anwender anschließend schrittweise weniger konservative Parameter wählen. Die Auswirkungen der Auswahl unterschiedlicher Werte ist in den Registerkarten für die jeweiligen Parameter dargestellt. Beispielsweise führt die Verringerung der Tätigkeitsdauer von >4 Stunden auf 1–4 Stunden zu einer Reduktion der abgeschätzten Exposition um 40%.

Info-Box 2

Es ist zu beachten, dass der “lineare Bericht” nur korrekt erzeugt wird, wenn Referenzwerte sowohl für die inhalative als auch die dermale Exposition eingegeben wurden. Ist dies nicht der Fall, erscheint eine Fehlermeldung, aber der Anwender kann nichtsdestotrotz zum „linearen Bericht“ gehen. Dies ist etwas beunruhigend und kann Zweifel entstehen lassen, ob die Berechnungen korrekt durchgeführt wurden. Nach Angaben im Benutzerhandbuch soll dies in der nächsten Version des Instruments geändert werden.

Man sollte auch beachten, dass der automatisch generierte Registerkartenname für das Ergebnis auf 31 Zeichen begrenzt ist (28 für Namen und CAS-Nummer + 3 für Leerzeichen und Klammern); daher sollten Abkürzungen oder Akronyme für den Stoffnamen zu Beginn der Abschätzung eingegeben werden.

Wenn alle Parameter ausgewählt wurden, gibt es zwei Möglichkeiten der Ergebnisdarstellung:

- Mittels der Schaltfläche „Generate report“ wird im gleichen Arbeitsblatt („InputModule“, grüne Box rechts des Eingabeabschnittes) ein Bericht über die Expositionsabschätzung dargestellt. Dies ist etwas verwirrend, da es sich um das Ergebnis und nicht um eine Eingabe handelt. Der Bericht wird unabhängig davon angezeigt, ob indikative Referenzwerte eingegeben wurden oder nicht. Das Ergebnis kann in der in einer anderen IT-Umgebung durchgeführten Risikocharakterisierung verwendet werden. Die Option „Generate report“ ist insbesondere für die oben erwähnte Iteration hilfreich, da der Bericht automatisch aktualisiert wird, wenn Parameter geändert werden und man die Schaltfläche erneut anklickt. Hierbei ist zu beachten, dass der Bericht jedes Mal überschrieben wird, wenn der Anwender diese Schaltfläche betätigt.
- Die Betätigung der Schaltfläche „Copy scenario results to the linear report“ erzeugt eine neue Registerkarte (deren Name durch Stoffname und CAS-Nummer gebildet wird), welche die Ergebnisse einschließlich einer einfachen Risikocharakterisierung beinhaltet, wenn alle Referenzwerte im „InputMoudule“ eingegeben worden sind (siehe aber Info-Box 2 für Einschränkungen). Diese Funktion ist insbesondere dann hilfreich, wenn verschiedene Szenarien für einen Stoff durchlaufen werden sollen. Jedes Szenario wird in dem Arbeitsblatt für den Stoff in einer neuen Reihe gespeichert. Unter Verwendung der Schaltfläche „Clear Scenario“ kann die Abschätzung für ein anderes Szenario für den gleichen Stoff durchlaufen werden. Es ist zu beachten, dass nur der so generierte Bericht für die weitere Verwendung gespeichert wird (siehe aber Diskussion unten).

Zusammenfassend scheint es am hilfreichsten zu sein, zunächst eine Iteration wie oben beschrieben durchzuführen und das Ergebnis der letzten Iteration anschließend über „Copy scenario results to the linear report“ in den „linearen Bericht“ zu überführen. Diese Prozedur ist für alle zu bewertenden Szenarien zu wiederholen.

Als Beispiel wurde die Exposition gegenüber einer Flüssigkeit mit einem Dampfdruck von 30000 Pa (hohe Flüchtigkeit) abgeschätzt. Alle anderen Eingangsdaten sind in dem mittels „Generate report“-Schaltfläche erzeugten Bericht enthalten (Abbildung 1-2).

Worker Exposure report for Substance test 3 (CAS NO. 456-78-9)	
High fugacity	Exposure Estimate (Units ppm)
Exposure scenario (Test scenario 3)	
Process Category 7 -Industrial spraying.	
Industrial activity	
Initial Exposure Estimate	500
Exposure modifiers	
The activity takes place **Indoors**	
Ventilation is present with an assumed **efficiency of 95%**	25
The maximum duration of the activity is **>4 hours (default)**	25
Respiratory protection is not used	25
Is this substance part of a preparation? No	
Assessment factor applied is 1	25
The Inhalative Exposure Estimate for this Exposure Scenario is	**25 ppm**
Dermal exposures may arise from this Exposure Scenario and assuming a maximal exposed skin area	1500 (sq cm)
are estimated at	**2.1429 mg/kg/day**

Abbildung 1-2 Druckbildschirm des Ergebnisberichtes für eine in industriellen Sprühaktivitäten verwendete Flüssigkeit

Dieses Beispiel einer stark flüchtigen Flüssigkeit wurde auch mit dem EMKG-EXPO-TOOL bewertet (Kapitel 1.2.4.2).

Diskussion der Eignung/Verwendbarkeit

In ECETOC TRA für den Arbeitsplatz ist nicht immer klar zu erkennen, wenn ein Feld deaktiviert wurde. Beispielsweise wird für einen Feststoff das Feld für den Dampfdruck deaktiviert. Es ist allerdings immer noch möglich, in den größeren Zellbereich (von dem das Feld zum Dampfdruck einen Teil ausfüllt) einen Wert einzugeben (siehe Abbildung 1-3). Dies scheint nicht zu falschen Berechnungen zu führen, kann für den Anwender aber irreführend sein.

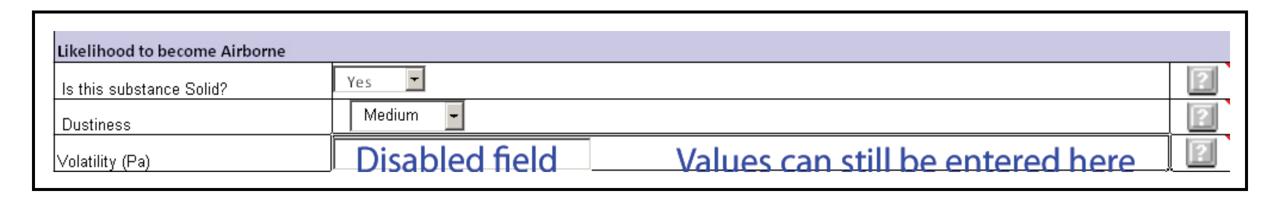


Abbildung 1-3 Druckbildschirm von Feldern im Eingabeblatt (Arbeitsblatt “InputModule”)

Zudem können die (stoff-spezifischen) Eingangsdaten nicht mehr geändert werden sobald ein Bericht erzeugt wurde. Die Schaltfläche „Clear all“ muss betätigt werden, um Daten für einen neuen Stoff einzugeben. Dies ist zunächst etwas ungewöhnlich, aber Anwender werden sich nach Eingabe mehrerer Datensätze daran gewöhnen.

Problematischer aus inhaltlicher Sicht ist die Handhabung von Feststoffen, die in Flüssigkeiten eingesetzt werden. Wird beispielsweise ein Feststoff für PROC 7 (Industrielles Sprühen)

oder PROC 10 (Auftragen durch Rollen oder Streichen) bewertet, ist es im Werkzeug unmöglich, die Verwendung in einem Gemisch auszuwählen. Dies ist nicht sofort einleuchtend, da einige Feststoffe in diesen Prozessen in flüssigen Gemischen eingesetzt werden. Zudem definiert ECETOC (2009) PROC7 als „Sprühen des Stoffes oder von Gemischen, die den Stoff enthalten, in industriellen Anwendungen wie z.B. Anstrichen“ (unsere Hervorhebung). Anwender werden hiermit allein gelassen und dieser Aspekt wird im „Technical Report“ und dem kurzen Benutzerhandbuch nicht behandelt.

Ein weiterer Aspekt bezieht sich auf lokale Effekte (z.B. Hautreizung und Sensibilisierung) nach dermaler Applikation. ECETOC TRA für den Arbeitsplatz konzentriert sich auf die Berechnung einer Körperdosis (in mg/kg x d) für die dermale Exposition. Innerhalb der Herangehensweise des Instruments macht dies Sinn, da für die Berechnung der gesamten Exposition sowohl die inhalative als auch die dermale Exposition in einer identischen Einheit angegeben werden müssen. Allerdings kann in einigen Fällen die Angabe einer Dosis in µg/cm^2 für die dermale Risikocharakterisierung relevanter sein. Eine auf die Hautfläche bezogene Dosis wird in dem Instrument nicht automatisch berechnet, kann aber im Arbeitsblatt „Dermal“ nachgeschlagen werden. Zudem erlaubt ECETOC TRA für den Arbeitsplatz nicht die Eingabe eines Referenzwertes in µg/cm^2. Daher muss eine Risikocharakterisierung basierend auf der Hautfläche (z.B. für Hautsensibilisierung) manuell durchgeführt werden. Dieses Problem stellt sich bei der Inhalation nicht, da Konzentrationen in dem im „InputModule“ generierten Bericht und auch im „linearen Bericht“ berechnet werden.

Es ist an dieser Stelle darauf hinzuweisen, dass ECETOC TRA für den Arbeitsplatz nach ECHA CSA (2008, Kapitel R.14) die dermale Exposition bei vorhandener Absaugung („Yes“ bei „Is Local Exhaust Ventilation present ?“) in einigen Fällen bedeutend unterschätzt, indem der Absaugung eine sehr hohe Effektivität für die dermale Exposition zugewiesen wird. In ECHA CSA (2008, Kapitel R.14, Entwurfsfassung 2010) wird daher angeraten, in diesem Fall außerhalb des Instruments die Effektivität auf 0 oder jedenfalls einen Wert deutlich unter 90% zu setzen, um eine konservative Abschätzung zu erhalten.

Allgemeiner basiert ECETOC TRA für den Arbeitsplatz auf dem EASE-Modell und somit gelten die Einschränkungen des letztgenannten Modells. Prinzipiell kann die Exposition gegenüber Aerosolen und Prozessrauchen nicht adäquat abgeschätzt werden.

Eines der sehr hilfreichen Merkmale von ECETOC TRA für den Arbeitsplatz stellt die Möglichkeit dar, für einen Stoff mehrere Szenarien zu durchlaufen. Diese werden in separaten Reihen im gleichen Arbeitsblatt gespeichert. Die entsprechenden Registerkarten sind nach dem Stoffnamen und der CAS-Nummer benannt (Info-Box 2). Diese Funktionalität ist sehr nützlich, wenn mehrere Stoffe innerhalb einer Datei zu bewerten sind, da die resultierenden Registerkarten (eine pro Stoff) eine einfache Navigation zwischen den Ergebnissen für die verschiedenen Stoffe erlauben. Wenn mehr und mehr Stoffe/Szenarien innerhalb einer einzigen MS Excel®-Datei durchlaufen werden, kann dies ab einem gewissen Punkt allerdings verwirrend werden. Daher kann es hilfreich sein, sich vor der Arbeit mit dem Instrument

zunächst einen Überblick über die benötigte Anzahl an Stoffen und Szenarien zu verschaffen, für die eine Expositionsabschätzung nötig ist. In Abhängigkeit von der Anzahl und dem Ausmaß der Abschätzungen kann der Anwender sich beispielsweise entscheiden,

- nur mit einer Datei zu arbeiten (wenige Stoffe mit wenigen Szenarien),
- mit drei Dateien zu arbeiten (drei Gruppen von Stoffen mit jeweils wenigen Szenarien),
- für jeden Stoff eine eigene Datei anzulegen, da für jeden Stoff viele Szenarien zu bewerten sind oder
- die integrierte Version (siehe Info-Box 1) zu verwenden, da viele Stoffe und Szenarien zu bewerten sind und die Stapelverarbeitungsfunktion als hilfreich erachtet wird.

Es ist zu beachten, dass der „lineare Bericht“ (d.h. der gespeicherte und nach einer Reihe von Bewertungen weiterhin verfügbare Ergebnisabschnitt) nicht den tatsächlich eingetragenen Dampfdruck, sondern nur die diesem Dampfdruck zugeordnete Flüchtigkeit enthält. Es kann hilfreich sein, den Dampfdruck manuell zum Zwecke der zukünftigen Bezugnahme und zur Dokumentation in den „linearen Bericht“ einzutragen.

Ungeachtet der genannten Einschränkungen ist ECETOC TRA für den Arbeitsplatz in seinen Annahmen sehr transparent. Es ist zudem aufgrund seiner Umsetzung in MS Excel®, der Möglichkeit zur Berechnung verschiedener Szenarien in einer einzigen Datei und des knappen Benutzerhandbuchs mit Details zu den Schlüsselfunktionen anwenderfreundlich.

Das folgende Beispiel zeigt, wie ECETOC TRA in einem „iterativen 3-Stufen-Ansatz zur Expositionsbewertung“ angewendet werden kann (Teil II des Praxisführers, Kapitel 9.8). Dieser Ansatz ist Teil der “Guidance on Use and ES Development and Supply Chain Communication” von CEFIC, die detaillierter in Teil II des Praxisführers (Kapitel 10.3) diskutiert wird.

Beispiel: „Iterativer 3-Stufen- Ansatz zur Expositionsbewertung“

Für Stoffe mit vielen Verwendungen und komplizierten Lieferketten ist es für den Hersteller des Stoffes aufwendig und manchmal unmöglich alle Verwendungen zu kennen. Der folgende iterative 3-Stufen-Ansatz zur Expositionsbewertung wurde insbesondere für Unternehmen entwickelt, die mit einer großen Anzahl von Stoffen umzugehen haben. Er schließt auch den Schritt der Risikocharakterisierung mit ein. Der Ansatz ermöglicht es, die umfangreichen existierenden Instrumente zur Entwicklung und Ausgestaltung von Expositionsszenarien zu nutzen und diese in eine festumrissene Gesamtstruktur einzubinden. Die Kommunikation in der Lieferkette kann hierdurch effizienter gestaltet werden, in dem sie auf die Fälle beschränkt wird, in denen sie tatsächlich erforderlich ist (siehe hierzu auch das Kapitel 9.8 im Teil II des REACH Praxisführers).

Schritt 1: Basis-Expositionsbewertung mit ECETOC TRA
Im ersten Schritt wird das als konservativ angesehene Software-Instrument ECETOC TRA

verwendet, um eine Expositionsbewertung der Stufe 1 unter Einbeziehung **aller** in ECHA CSA 2008 (Kapitel R.12) aufgeführten Prozesskategorien (PROCs) zu erhalten. Es wird angenommen, dass die vollständige Liste der PROCs alle möglichen Verwendungen des betrachteten Stoffes beinhaltet. Dieser Schritt kann mit einem Minimum an stoff- und anwendungsspezifischen Informationen vollzogen werden. Die folgende Tabelle zeigt das Ergebnis von ECETOC TRA für einen Teststoff. Es weist aus, für welche der PROCs eine weitere Bewertung durchgeführt werden muss, um die sichere Verwendung zu gewährleisten (Antwort „Yes“ in der rechten Spalte). PROCs, für die diese Bewertung nach Stufe 1 bereits eine sichere Verwendung anzeigt, erhalten die Antwort „No“.

process categories [PROC]	Use Scenarios	Duration of activity [hours]	LEV (Y/N)	Estimated Exposition [ppm]	MoE [DNEL/ est expo]	Further assessment required
PROC 1	Use in a closed process with no likelihood of exposure	> 4 hours	Yes	0,01	31,8	No
PROC 2	Use in closed process with occasional controlled exposures e.g. during sampling	> 4 hours	Yes	0,5	0,636	**Yes** no refinement done – if needed, please contact manufacturer
PROC 3	Use in a closed batch process i.e. where only limited opportunity for breaching arises e.g. sampling	> 4 hours	Yes	0,1	3,18	No
PROC 4	Use in a batch or other process (including related process stages e.g. filtration, drying) where opportunities for exposure arise e.g. sampling, dis-/charging of materials	> 4 hours	Yes	1	0,318	**Yes** no refinement done – if needed, please contact manufacturer
PROC 5	Use in a batch process including chemical reactions and/or the formulation by mixing, blending or calendaring of liquid and solid-based products	> 4 hours	Yes	1	0,318	**Yes** for refinement see Chapter 9.2
PROC 6	Spraying of the substance or preparations containing the substance in industrial applications e.g. coatings	1–4 hours	Yes	12	0,026	**Yes** for refinement see Chapter 9.2
PROC 7	Dis-/charging the substance (or preparations containing the substance) to/from vessels	1–4 hours	No	6	0,053	**Yes** for refinement see Chapter 9.2
PROC 8	Filling containers with the substance or its preparations (including weighing)	1–4 hours	No	6	0,053	**Yes** for refinement see Chapter 9.2
PROC 9	Roller application or brushing of adhesives and other surface coatings	1–4 hours	No	300	0,001	**Yes** for refinement see Chapter 9.2

PROC 10	**Use as a blowing agent in the manufacture of foams, etc.**	**> 4 hours**	**Yes**	**0,5**	**0,636**	**Yes** no relevant PROC
PROC 11	**Use for coating/treatment of articles, etc. (including cleaning) by dipping or pouring**	**> 4 hours**	**Yes**	**3**	**0,106**	**Yes** for refinement see Chapter 9.2
PROC 12	**Production of products or articles from substance by compression, tabletting, extrusion or pelletisation**	**> 4 hours**	**Yes**	**3**	**0,106**	**Yes** no refinement done – if needed, please contact manufacturer
PROC 13	**Use as a laboratory reagent**	**1–4 hours**	**Yes**	**0,06**	**5,3**	**No**
PROC 14	**Use as a fuel**	**< 15 min**	**No**	**0,1**	**3,18**	**No**
PROC 15	**Use as a lubricant (including metal working fluids)**	**> 4 hours**	**Yes**	**50**	**0,006**	**Yes** no refinement done – if needed, please contact manufacturer

LEV (local exhaust ventilation): örtliche Absaugung; MoE (margin of exposure): Sicherheitsabstand, entspricht “risk characterisation ratio”, DNEL (derived no effect level): Grenzwert, unterhalb dessen der Stoff keine schädliche Wirkung ausübt

Nur die Verwendungen mit der Antwort „Yes” werden in Schritt 2 weiter berücksichtigt.

Schritt 2: Generische Expositionsbewertung

Eine Verfeinerung der Expositionsbewertung für ausgewählte Verwendungen wird auf Basis generischer Expositionsszenarien (GES) durchgeführt. GES sind in verschiedenen Industriebereichen und –zweigen in Entwicklung und es wird erwartet, dass zukünftig eine große Auswahl an GES öffentlich zur Verfügung stehen wird.
Erst in diesem zweiten Schritt werden detailliertere RMM in die Expositionsabschätzung eingeführt, die dann eine sichere Verwendung gewährleisten. In Schritt 2 können in Abhängigkeit vom Szenario und den Stoffeigenschaften verschiedene Instrumente zur Expositionsabschätzung verwendet werden. Soweit verfügbar, können Modelle höherer Stufen zur Berücksichtigung einer Expositionsminderung durch RMM Anwendung finden.

Schritt 3: Spezifische Expositionsbewertung

Wenn Schritt 2 nicht zu einer Beschreibung von Anwendungsbedingungen und RMM für eine sichere Verwendung führt, wird eine spezifische Bewertung durchgeführt, die Informationen von einzelnen Anwendern in der Lieferkette und eine Verfeinerung der RMM beinhaltet. Das Expositionsszenario wird weiterentwickelt und RMM zur Implementierung vorgeschlagen, die eine sichere Verwendung des Stoffes für diese spezifische Anwendung gewährleisten.

1.2.4.2 Das EMKG-Instrument zur Expositionsabschätzung

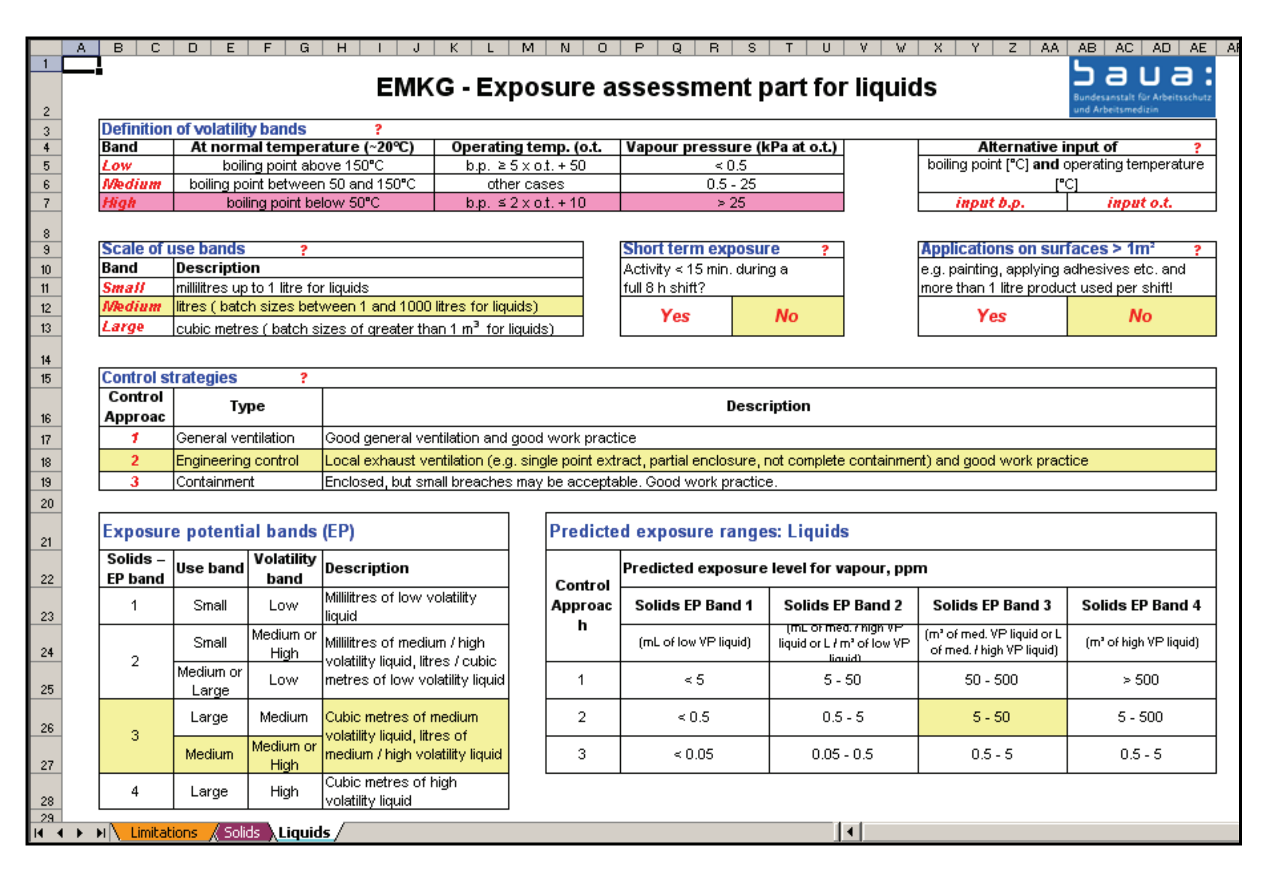
Das EMKG-Instrument zur Expositionsabschätzung (EMKG-EXPO-TOOL, MS Excel®) ist Teil des Einfachen Maßnahmekonzepts Gefahrstoffe (EMKG) der deutschen Bundesanstalt für Arbeitsschutz und Arbeitsmedizin (BAuA). Das Instrument verwendet einen Gruppenansatz („banding“) für die Bewertung der Exposition, der im Wesentlichen auf den von der UK Health and Safety Executive (HSE) entwickelten COSHH Essentials (Control of Substances Hazardous to Health Regulations) basiert. Das Konzept des Gruppenansatzes bedeutet hierbei, dass sowohl die Eingangsdaten als auch das Ergebnis in Form von Kategorien (Bändern) ausgedrückt wird, die oftmals um mindestens eine Größenordnung differieren (vgl. die verschiedenen „bands“ in 1-4).

Wichtige Punkte in Bezug auf das EMKG-EXPO-TOOL sind:

- Erfordert MS Excel® 97 oder neuer (MS Excel® 2002 noch nicht getestet)
- Schätzt nur die inhalative Exposition ab
- Einige Anwendungen und Stoffe sollten mit dem Instrument nicht bewertet werden (z.B. Sprühapplikationen, CMR-Stoffe; s. Arbeitsblatt „Limitations“ im Tool)

Das EMKG-EXPO-TOOL liegt nur in englischer Sprache vor und besteht aus drei verschiedenen Arbeitsblättern: eines welches die Grenzen erläutert sowie jeweils eines für Feststoffe und Flüssigkeiten. Die vom EMKG-EXPO-TOOL benötigten Eingangsdaten sind einfach (siehe Anhang 4.1-3). Hintergrundinformationen zu den Eingangsparametern sind ECHA CSA 2008 (Kapitel R.14.4.8.1) zu entnehmen. Zusätzlich stehen grundlegende Hilfsfunktionen und Ratschläge für die Anwendung des Instruments (z.B. zur Dateneingabe für Gemische) in Feldern, die mit einem Fragezeichen gekennzeichnet sind, zur Verfügung.

Abbildung 1-4 veranschaulicht das Arbeitsblatt für Flüssigkeiten.



EMKG - Exposure assessment part for liquids

baua: Bundesanstalt für Arbeitsschutz und Arbeitsmedizin

Definition of volatility bands ?

Band	At normal temperature (~20°C)	Operating temp. (o.t.	Vapour pressure (kPa at o.t.)
Low	boiling point above 150°C	b.p. ≥ 5 x o.t. + 50	< 0.5
Medium	boiling point between 50 and 150°C	other cases	0.5 - 25
High	boiling point below 50°C	b.p. ≤ 2 x o.t. + 10	> 25

Alternative input of ?	
boiling point [°C] **and** operating temperature [°C]	
input b.p.	*input o.t.*

Scale of use bands ?

Band	Description
Small	millilitres up to 1 litre for liquids
Medium	litres (batch sizes between 1 and 1000 litres for liquids)
Large	cubic metres (batch sizes of greater than 1 m³ for liquids)

Short term exposure ?	
Activity < 15 min. during a full 8 h shift?	
Yes	*No*

Applications on surfaces > 1m² ?	
e.g. painting, applying adhesives etc. and more than 1 litre product used per shift!	
Yes	*No*

Control strategies ?

Control Approac	Type	Description
1	General ventilation	Good general ventilation and good work practice
2	Engineering control	Local exhaust ventilation (e.g. single point extract, partial enclosure, not complete containment) and good work practice
3	Containment	Enclosed, but small breaches may be acceptable. Good work practice.

Exposure potential bands (EP)

Solids – EP band	Use band	Volatility band	Description
1	Small	Low	Millilitres of low volatility liquid
2	Small	Medium or High	Millilitres of medium / high volatility liquid, litres / cubic metres of low volatility liquid
	Medium or Large	Low	
3	Large	Medium	Cubic metres of medium volatility liquid, litres of medium / high volatility liquid
	Medium	Medium or High	
4	Large	High	Cubic metres of high volatility liquid

Predicted exposure ranges: Liquids

Control Approach	Predicted exposure level for vapour, ppm			
	Solids EP Band 1	Solids EP Band 2	Solids EP Band 3	Solids EP Band 4
	(mL of low VP liquid)	(mL of med. / high VP liquid or L / m³ of low VP liquid)	(m³ of med. VP liquid or L of med. / high VP liquid)	(m³ of high VP liquid)
1	< 5	5 - 50	50 - 500	> 500
2	< 0.5	0.5 - 5	5 - 50	5 - 500
3	< 0.05	0.05 - 0.5	0.5 - 5	0.5 - 5

Limitations | Solids | Liquids

Abbildung 1-4 Druckbildschirm des Arbeitsblattes für Flüssigkeiten im EMKG-EXPO-TOOL

Die Einsatz des Instruments ist einfach und (mit Ausnahme alternativer Eingaben für den Siedepunkt und die Prozesstemperatur) der Nutzer muss nur die rot und kursiv hervorgehobenen Felder (z.B. „Medium“ im Abschnitt der „volatility bands“) auswählen.

Die Anwendung des Instruments beinhaltet die folgenden Schritte:

- Definition des Staubungsverhaltens (Feststoffe) oder der Flüchtigkeit (Flüssigkeiten), d.h. Tendenz des Stoffes in die Luft überzugehen
- Angabe des Mengenbands für die Anwendung (Menge Stoff)

Diese beiden Schritte allein definieren die Kategorie („band“) für das Expositionspotential (EP), das dann in der unteren rechten Tabelle des Arbeitsblattes in vorhergesagte Expositionsbereiche umgerechnet wird (diese Tabelle kann als Ergebnistabelle angesehen werden).

- Auswahl der Schutzstrategie

Dieser letzte Schritt modifiziert den vorhergesagten Expositionsbereich in der entsprechenden EP-Spalte.

Das Instrument berechnet das Ergebnis in Form von Konzentrationsbereichen des Stoffes in der Luft, die für Feststoffe in mg/m³ und für Flüssigkeiten in ppm (parts per million, oder Angabe in mL/m³) angegeben werden. Beispielsweise ist die Konzentration für eine Flüssig-

keit in EP3 mit örtlicher Absaugung ("local exhaust ventilation") 5-50 ppm (Abbildung 1-4). Der obere Wert des angegebenen Bereichs, d.h. 50 ppm in diesem Beispiel, wird für den Vergleich mit dem DNEL herangezogen (ECHA CSA 2008, Kapitel R.14.4.8.5).

Diskussion der Eignung/Verwendbarkeit

Wie bereits oben erwähnt, kann das EMKG-EXPO-TOOL für einige Anwendungen/Stoffe nicht verwendet werden und der Benutzer sollte immer die im Instrument enthaltene Beschreibung zu Rate ziehen.

Ferner sind die Schätzungen generisch und mit Unsicherheiten behaftet. Allerdings trifft das Instrument mehrere konservative Annahmen, wie beispielsweise:

- Die Konzentration eines Stoffes (in einem Gemisch) wird als 100% angenommen.
- Die Expositionsdauer wird als vollständige Schichtlänge angenommen (mit der einzigen Ausnahme von Expositionen mit einer Dauer von weniger als 15 Minuten).

Wenn außerdem der obere Wert des vorausgesagten Expositionsbereiches für den Vergleich mit dem DNEL herangezogen wird, ist deshalb davon auszugehen, dass das Instrument trotz der Unsicherheiten eine sichere Verwendung vorhersagen kann.

Ferner sollte der Benutzer konservativere Parameter wählen, wenn Unsicherheiten hinsichtlich eines bestimmten Eingangsparameters bestehen. Dies trifft insbesondere auf die Beurteilung des Staubungsverhaltens zu, die ein subjektives Element beinhaltet.

Sowohl für Feststoffe als auch für Flüssigkeiten kann der vorhergesagte Expositionsbereich sehr hohe Werte annehmen und als > 10 mg/m^3 (Feststoffe) bzw. > 500 ppm (Flüssigkeiten) angegeben werden (EP4 in Verbindung mit einer nur allgemeinen Lüftung, d.h. natürliche Lüftung oder Lüftung mit einfachen technischen Maßnahmen wie Ventilator). Diese Werte liegen nahe beim deutschen Allgemeinen Staubgrenzwert am Arbeitsplatz von 10 mg/m^3 bzw. nahe beim höchsten deutschen Arbeitsplatzgrenzwert für Dämpfe von 1000 ppm (beide nach TRGS 900). Nach ECHA CSA 2008 (Kapitel R.14.4.8.3) wird die Verwendung dieser Werte nicht empfohlen.

Allgemein

- wird eine Abschätzung höherer Stufe benötigt, wenn der DNEL unterhalb der oberen vorhergesagten Exposition liegt (z.B. DNEL = 20 ppm im Vergleich mit einer vorhergesagten Exposition = 50 ppm im obigen Beispiel).
- wird eine sichere Verwendung gezeigt, wenn der DNEL oberhalb der oberen vorhergesagten Exposition liegt (z.B. DNEL = 150 ppm im Vergleich mit einer vorhergesagten Exposition = 50 ppm im obigen Beispiel).

ECHA CSA 2008 (Kapitel R.14.4.8.5) führt aus, dass eine sichere Verwendung im letztgenannten Fall nur in Verbindung mit der Anwendung des geeigneten Schutzleitfadens („Control Guidance Sheets" (CGS), herausgegeben von HSE) sichergestellt ist

(http://www.coshh-essentials.org.uk/assets/live/g###.pdf, wobei ### durch die entsprechende CGS-Nummer zu ersetzen ist, die wiederum in Appendix R.14-2 in ECHA CSA 2008 zu finden ist; deutsche Versionen mit identischen Nummern stehen bei der BAuA zur Verfügung:
http://www.baua.de/de/Themen-von-A-Z/Gefahrstoffe/EMKG/Schutzleitfaeden.html?__nnn=true&__nnn=true)[3].

Diese CGS enthalten Empfehlungen der guten Praxis zur Anwendung der entsprechenden Maßnahmen (z.B. hinsichtlich Gestaltung und Ausrüstung von Arbeitsplätzen und Anlagen, Wartung von Anlagen und persönlicher Schutzausrüstung des Arbeitnehmers, soweit zutreffend).

1.2.5 Verwendung von Instrumenten zur Expositionsabschätzung – höhere Stufen

Es sind mehrere Instrumente der höheren Stufe entwickelt worden, die zur Expositionsabschätzung verwendet werden können. Eines der Hauptprobleme besteht darin, dass diese sich teilweise noch in der Weiterentwicklung befinden und jede Beschreibung demnächst mit Erscheinen einer neuen Version veraltet sein kann. Anhang 4.1-2 enthält eine kurze Übersicht und Quellen für Instrumente der höheren Stufen.

Um bei der Expositionsabschätzung die Besonderheiten zu berücksichtigen, die Metalle und anorganische Stoffe aufweisen, wurde das Instrument MEASE entwickelt (es ist im Internet verfügbar unter: http://www.ebrc.de/ebrc/ebrc-mease.php). Grundlagen dieses Instruments sind zum einen das Expositionsabschätzungs-Modell EASE (verfügbar unter http://www.hse.gov.uk/research/rrhtm/rr136.htm), zum anderen einige gemessene Daten. MEASE bietet bei einigen Eingabegrößen mehr Differenzierungsmöglichkeiten als ECETOC TRA. Beispielsweise kann die Flüchtigkeit eines Feststoffes nicht nur beschrieben werden durch niedrige, mittlere oder hohe Staubigkeit. Es kann auch eine Kategorie „massive object“ ausgewählt werden.

1.2.5.1 Stoffenmanager

Das internetbasierte Instrument Stoffenmanager (auf Holländisch entwickelt, aber auch in einer (begrenzten) englischen Version verfügbar) ermöglicht nach Registrierung auf der Website eine Abschätzung der inhalativen und dermalen Exposition gegenüber Feststoffen und Flüssigkeiten. Während aus der Expositionsabschätzung für die Inhalation ein quantitativer Schätzwert für die Expositionskonzentration resultiert, wird die dermale Exposition nur

---

3 COSHH Essentials, das dem EMKG-EXPO-TOOL sehr ähnlich ist, steht als internetbasierte Anwendung zur Verfügung (http://www.coshh-essentials.org.uk/). Das Ergebnis dieses Instruments ist hinsichtlich der Expositionsabschätzung nicht so geradlinig wie EMKG-EXPO-TOOL und wird daher hier nicht weiter betrachtet. Es ist zu beachten, dass es auch eine “S”-Serie der CGS gibt, z.B. S101 für die Auswahl persönlicher Schutzausrüstung (http://www.coshh-essentials.org.uk/assets/live/S101.pdf).

qualitativ in Form von Punktzahlen zwischen 1 (vernachlässigbar) und 6 (extrem) beschrieben.

ECHA CSA 2008 (Kapitel R.14.5.1) bezieht sich auf eine andere (Spreadsheet-) Version, die nicht öffentlich verfügbar ist. Die Verwendung unterschiedlicher Perzentile, einschließlich des 50. Perzentils (Median), wie in ECHA CSA 2008 beschrieben, ist jedoch mit der öffentlichen, internetbasierten Version nicht möglich. Vielmehr gibt die letztgenannte Version eine als 90. Perzentil definierte „worst case"-Schätzung an.

Als Instrument der höheren Stufe benötigt der Stoffenmanager detailliertere Eingangsinformationen als beispielsweise das oben diskutierte EMKG-EXPO-TOOL. Insbesondere erlaubt es die Auswahl einer Reihe von Schutzmaßnahmen, wie z.B. Einkapselung, verschiedene Formen der Lüftung und der persönlichen Schutzausrüstung („personal protective equipment", PPE). Abbildung 1-5 zeigt ein Beispiel für die vom Instrument benötigte Art von Informationen. Eine ausführlichere Liste der benötigten Eingangsparameter ist in Anhang 4.1-4 zu finden.

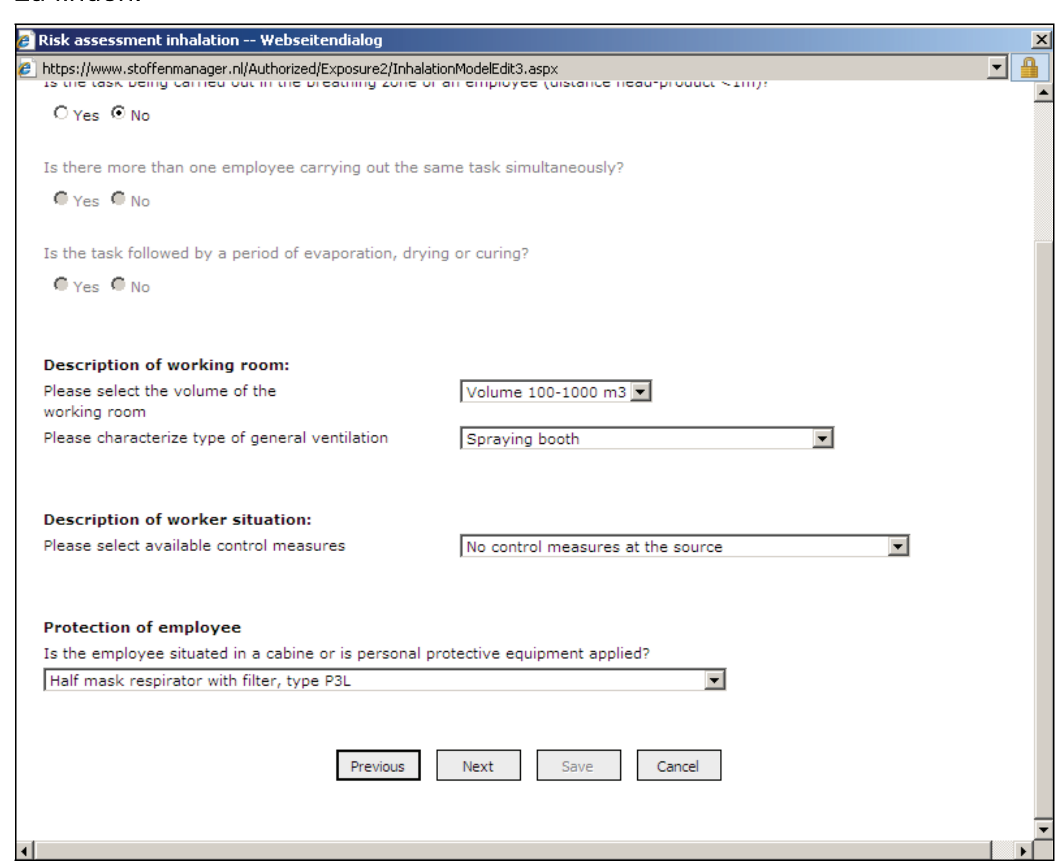


Abbildung 1-5 Druckbildschirm von einem von mehreren Eingabebildschirmen des Stoffenmanagers

Für einige sehr spezifische Stoffe/Tätigkeiten (detailliert beschrieben unter: https://www.stoffenmanagernl/Public/Applicability.aspx) kann der Stoffenmanager nicht direkt verwendet werden. Ferner nimmt das Inhalationsmodell eine Prozesstemperatur von 20°C

an und setzt somit Expertenwissen zur Umrechnung von Eingangsdaten (Dampfdruck) voraus, wenn die Prozesstemperatur deutlich höher oder niedriger ist.

Stoffenmanager verlangt vom Benutzer

- zunächst in Menüpunkt BASIC INFORMATION einige allgemeine Informationen, wie Abteilungen innerhalb der Firma und Lieferanten der Gemische („products"), zu definieren und
- dann die Stoffe („components") in dem Gemisch und die Gemische selbst zu beschreiben (ebenfalls im Menüpunkt BASIC INFORMATION). Für eine kleine Anzahl von Stoffen ist es einfacher, die Gemische zu definieren und dann die Stoffe mit der Funktion „Create a new component" im Abschnitt „Risk assessment" auf der Seite „Product information" einzurichten. Bei vielen Stoffen ist es nützlich, zunächst alle Stoffe über den Menüpunkt BASIC INFORMATION – COMPONENTS einzurichten.

Nachdem diese grundlegenden Informationen eingegeben sind, dient der Menüpunkt RISK ASSESSMENT zur eigentlichen Durchführung der Expositionsabschätzung für die inhalative und dermale Exposition. Dies ist der Hauptteil, in dem detaillierte Angaben zu den Anwendungsbedingungen und Risikomanagement-Maßnahmen benötigt werden.

Info-Box 3

Stoffenmanager erlaubt den Import von xml-Dateien und zur Verwendung dieser Option werden Unterstützung und Beispiele angeboten. Das Management von Daten im xml-Format verlangt allerdings einige Erfahrung und stellt wahrscheinlich nur eine brauchbare Alternative dar, wenn viele Gemische mit diesem Instrument bewertet werden sollen.

Die Bewertung führt zu (Abbildung 1-6):

- einer Gefährdungsklasse („hc"): zwischen A (gering) und E (extrem) basierend auf den unter BASIC INFORMATION zugewiesenen R-Sätzen,
- einer Expositionsklasse („ec"): zwischen 1 (niedrig) und 4 (sehr hoch) sowie
- einem Risikowert („risk"): zwischen III (niedrig) und I (hoch)

Diese Ergebnisse spiegeln den in Stoffenmanager implementierten Gruppenansatz („banding") wieder, der dem des oben beschriebenen EMKG-EXPO-TOOLS recht ähnlich ist. Der Stoffenmanager erlaubt allerdings auch eine quantitative Abschätzung der Expositionskonzentration in der Arbeitsatmosphäre (über das „C" in der Box am rechten Rand in Abbildung 1-6. Diese Expositionskonzentration wird für jeden Stoff eines Gemisches berechnet, der in den oben beschriebenen Schritten definiert wurde.

	Name risk assessment	Product	Department	hc	ec	risk	
	Assessment1	TEST1	RA	A	3	III	C
	Paint A-1	Paint A	RA	B	1	III	C
	Paint B-1	Paint B	RA	B	2	III	C

Abbildung 1-6 Druckbildschirm der Ergebnisse der Risikobewertung im Stoffenmanager: Inhalation

Diese Expositionskonzentrationen beziehen sich auf die ausgewählte Tätigkeit und ihre Dauer. Wenn die Dauer weniger als 8 Stunden (Schichtlänge) beträgt, kann ein Schichtmittelwert abgeleitet werden, der gewöhnlich für den Vergleich mit dem DNEL benötigt wird (Info-Box 02).

Info-Box 4

Stoffenmanager erlaubt die Berechnung der "durchschnittlichen täglichen Konzentration" (d.h. des Schichtmittels). Es ist hierbei wichtig, zunächst die Exposition für alle Tätigkeiten zu berechnen und die durchschnittliche tägliche Konzentration erst abzuschätzen, nachdem alle anderen Schritte abgeschlossen sind. Für Flüssigkeiten wird das Schichtmittel gegenüber dem Dampf für jeden einzelnen Stoff berechnet, während für Feststoffe („powders") das Schichtmittel für die Exposition gegenüber dem Staub des Gemisches angegeben wird. Wenn man eine durchschnittliche tägliche Konzentration neu berechnet, ist es wichtig sich darüber im Klaren zu sein, was berechnet wird (einatembarer Staub oder Dampf), da diese Angaben nicht mehr im Nachhinein geändert werden können.

Da der Stoffenmanager ursprünglich für die Prioritätensetzung entwickelt wurde und Angaben zur Gefährdung für das Gemisch (in Form von R-Sätzen) enthält, ist die Expositionsabschätzung nur eine der Funktionalitäten dieses Instrumentes. Beispielsweise ermöglicht die Auswahl von Schutzmaßnahmen (Menüpunkt CONTROL MEASURES) es dem Benutzer, solche Maßnahmen herauszufinden, die zur Beherrschung identifizierter Risiken verwendet werden können. Zudem kann nach der Auswahl von Schutzmaßnahmen ein Aktionsplan (Menüpunkt ACTION PLAN) entwickelt werden, der die in dem Unternehmen des Benutzers notwendigen Aktivitäten implementiert.

Diskussion der Eignung/Verwendbarkeit

Einschränkungen der Verwendbarkeit des Instruments wurden bereits oben beschrieben und sollten immer als erste berücksichtigt werden.

Stoffenmanager erlaubt in der aktuellen Version 3.5 nur die quantitative Abschätzung der inhalativen Exposition, die als eine – wie es das Instrument nennt – „worst case"-Expositionskonzentration (definiert als 90. Perzentil) angegeben wird. Nach ECHA CSA 2008

(Kapitel R.14.5.1.2) sollen bei Verwendung dieser Expositionswerte eher typische denn extreme Eingangswerte zugrunde gelegt werden.

Es muss auch betont werden, dass das Instrument ein grobes Vorgehen darstellt und es daher wenig sinnvoll ist, die quantitativen Ergebnisse, die oftmals ein unangemessenes Maß an Genauigkeit implizieren (z.B. 28,64 mg/m^3), direkt zu verwenden. Vielmehr wird vorgeschlagen, das Ergebnis auf zwei signifikante Stellen zu runden (z.B. 29 mg/m^3).

In der aktuellen Version sind einige Funktionalitäten des Stoffenmanagers (u.a. die sehr nützliche Dokumentationsfunktion (Menüpunkt REPORTS) und eine REACH-Funktion) auf die holländische Sprachversion beschränkt. Wenngleich diese Funktionen wahrscheinlich in einer zukünftigen englischen Version verfügbar sein werden, schränkt dieser Umstand die Anwendbarkeit des Instruments zurzeit etwas ein.

1.2.5.2 RISKOFDERM Calculator

Der RISKOFDERM Calculator wurde im Rahmen eines EU-Forschungsvorhabens entwickelt.[4] Das Instrument bewertet die dermale Exposition gegenüber Gemischen und differenziert hierbei zwischen einer Exposition der Hände und anderer Körperteile (nur Exposition der Hände in DEO-Einheit 1 und nur Exposition des Körpers in DEO-Einheit 6; s. Info-Box 5 und Tabelle 1-2). Die Exposition gegenüber Bestandteilen des Gemisches wird durch Multiplikation der Exposition gegenüber dem Gemisch mit dem Anteil des Bestandteils in dem Gemisch berechnet.

Neben der “spreadsheet”-Version (MS Excel®) bezieht sich ECHA CSA 2008 (Kapitel R.14.5.2) auf eine internetbasierte Version des RISKOFDERM Calculators, die zurzeit jedoch nicht öffentlich verfügbar ist und hier nicht diskutiert wird.

Die „spreadsheet“-Version beinhaltet einzelne Arbeitsblätter, wobei nur die jeweils aktiven als Register sichtbar sind.

Info-Box 5

Die sechs Prozesse des Instruments basieren auf den sogenannten “Dermal Exposure Operations“-Einheiten (DEO), die detailliert von Warren et al. (2006) beschrieben werden. Tabelle 1-2 fasst die DEO-Einheiten zusammen, gibt einige Beispiele für typische Tätigkeiten jeder Einheit und führt die wesentlichen Arten der dermalen Exposition auf. Es ist zu beachten, dass die Prozessbezeichnungen in dem “Process”-Arbeitsblatt der aktuellen Version (v. 2.1) des Calculators etwas abweichen; die vollständigen Titel sind aber in den prozessspezifischen Arbeitsblättern genannt.

4 RISKOFDERM: "Risk assessment for occupational dermal exposure to chemicals" (2000-2004, RTD Project: QLK4-CT-1999-01107), gefördert durch die Europäische Gemeinschaft und mehrere nationale Behörden und durchgeführt von 15 Institutionen aus 11 verschiedenen Mitgliedsstaaten.

- Das „Start“-Arbeitsblatt wird nach Aufrufen der Datei angezeigt und erlaubt es dem Benutzer, zum „Process“-Arbeitsblatt zu navigieren (das „Start“-Arbeitsblatt verschwindet hierbei aus dem Register).
- Das „Prozess“-Arbeitsblatt stellt den allgemeinen Eingangsbildschirm dar, von dem aus der für das betrachtete ES am besten geeignete Prozess auszuwählen ist. Wiederum ist dieses Arbeitsblatt im Register nicht mehr sichtbar, wenn ein Prozess ausgewählt wurde, kann aber in einem prozessspezifischen Arbeitsblatt jederzeit durch Klicken der „Back“-Schaltfläche aufgerufen werden.
- Das Arbeitsblatt „Changes and validity“ beinhaltet die Validitätsbereiche des Modells, die jedoch auch in den prozessspezifischen Arbeitsblättern aufgeführt sind (Abbildung 1-7).
- Das kurze „Explanations“-Arbeitsblatt enthält wichtige Informationen und sollte vor Anwendung des Instruments gelesen werden. Es ist zudem sehr hilfreich, den Leitfaden des RISKOFDERM Calculators (s. Anhang 4.1-2) zu konsultieren, da er Einzelheiten und Beispiele zu vielen der Prozesse bereit stellt (z.B. auch zu Tätigkeiten, die nicht durch eine spezifische DEO-Einheit abgedeckt sind). Der Leitfaden stellt auch hilfreiche Hintergrundinformationen zu allen Eingangsparametern und zum Modelloutput zur Verfügung.

Tabelle 1-2 Prozesse des RISKOFDERM Calculators (nach Warren et al. (2006) mit Modifizierungen auf Basis der “spreadsheet”-Version)

DEO	Titel	Beispiele	Hauptformen dermaler Exposition
1	Handling of (potentially) contaminated objects (Umgang mit (potentiell) kontaminierten Objekten)	Mischen, Füllen	Kontakt mit verunreinigten Oberflächen; auch Deposition von Aerosolen und direkter Kontakt oder Eintauchen
2	Manual dispersion of products (Manuelle Verteilung von Produkten)	Wischen, allgemein: Verteilung mit einem Werkzeug ohne Griff	Eintauchen und etwas Kontakt mit verunreinigten Oberflächen
3	Dispersion of products with a hand-held tool (Verteilung von Produkten mit tragbaren Werkzeugen)	Streichen, Verteilung mit einer Rolle oder einem Kamm	Kontakt mit verunreinigten Oberflächen und etwas direkter Kontakt, z.B. Spritzer und Tropfen
4	Spray dispersion of a product (Versprühen eines Produkts)	Sprühausbringung mittels Gerät (mit oder ohne Druck)	Deposition von Aerosolen und Kontakt mit verunreinigten Oberflächen
5	Immersion of objects into a product (Eintauchen von Objekten in ein Produkt)	Mechanisches Eintauchen (z.B. mittels Winde, aber auch manuell)	Eintauchen und Kontakt mit verunreinigten Oberflächen

DEO	Titel	Beispiele	Hauptformen dermaler Exposition
6	Mechanical treatment of solid objects (Mechanische Bearbeitung von festen Objekten)	Abschleifen, Sägen	Deposition von Aerosolen und Kontakt mit verunreinigten Oberflächen

Anmerkung:
Die Titel der Prozesse wurden im Original (mit deutscher Übersetzung in Klammern) beibehalten.

Die Anforderungen hinsichtlich der Eingangsparameter variieren je nach ausgewähltem Prozess, aber die benötigten Daten sind zumeist qualitativer Natur. Anhang 4.1-4 stellt beispielhaft die benötigten Eingangsparameter für einen Prozess dar.

Es ist nützlich, der Bewertung im Arbeitsblatt „Process“ einen Namen zu geben, um zwischen verschiedenen Bewertungen zu unterscheiden. Dieser Name wird automatisch in das anschließend ausgewählte, prozessspezifische Arbeitsblatt sowie in das Ergebnisarbeitsblatt (s.u.) übernommen.

Wenn das prozessspezifische Arbeitsblatt einmal ausgewählt ist, ist die Anwendung des Instruments recht einfach. Beispiele und ein gewisses Maß an Anleitung werden in Form von Kommentaren zu den einzelnen Feldern sowie im „Explanations“-Arbeitsblatt gegeben. Der Benutzer wählt in der Regel die geeignete Antwort aus Auswahllisten aus, wobei die Ergebnisse automatisch aktualisiert werden. Dies erlaubt es dem Benutzer, den Einfluss verschiedener Parameter und ihrer Werte unmittelbar zu beurteilen.

Eine Berechnung (ein Beispiel für DEO-Einheit 3, hier könnte es sich beispielsweise um das Streichen einer Wand mit einem Pinsel handeln) ist in Abbildung 1-7 dargestellt. Die Werte wurden hierbei so ausgewählt, dass die Warnhinweise des Instruments angezeigt werden. Es handelt sich somit nicht um ein typisches Beispiel.

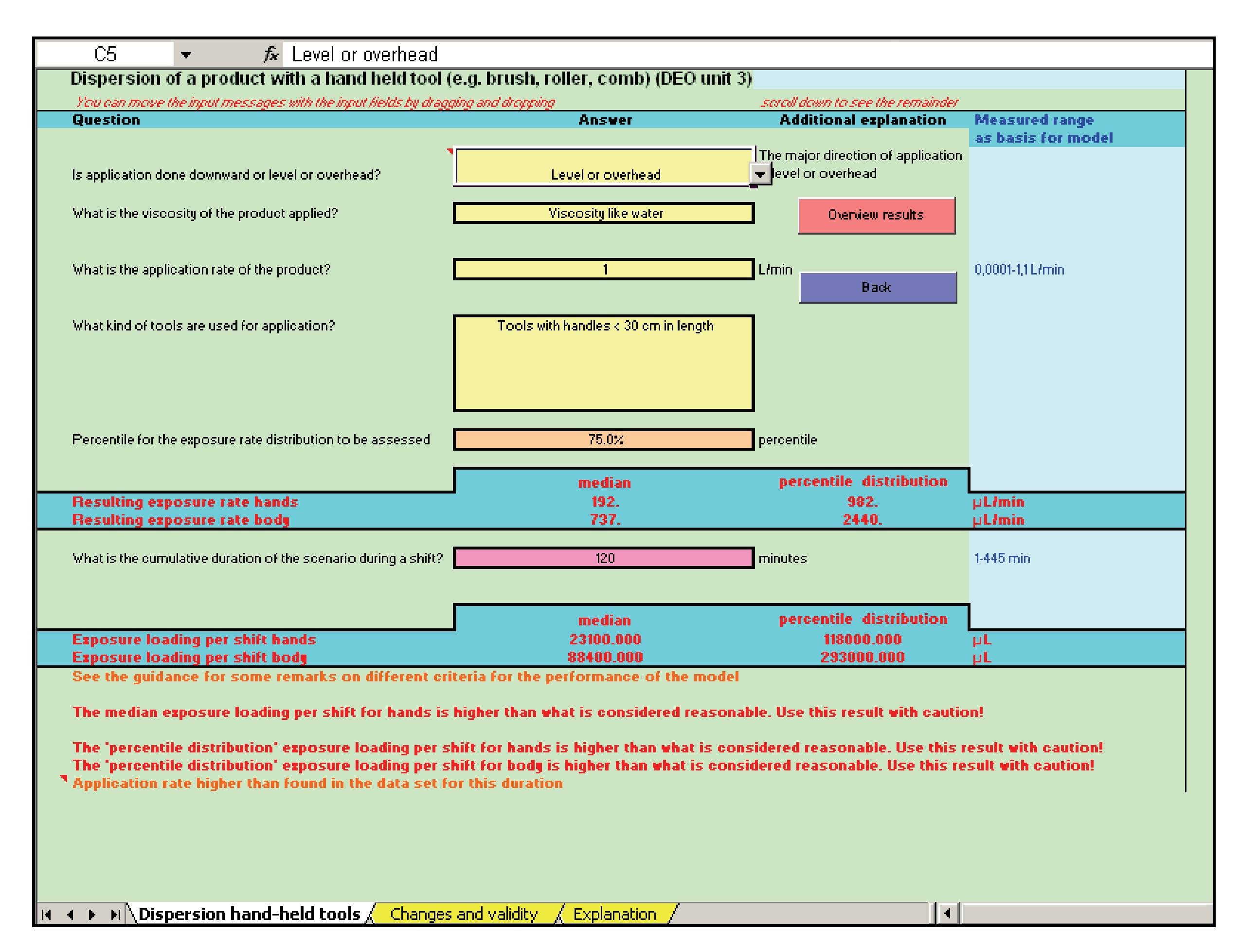


Abbildung 1-7 Druckbildschirm einer Berechnung mit DEO-Einheit 3 des RISKOFDERM Calculators (zu beachten sind die Warnhinweise und Kommentare)

Wie in Abbildung 1-7 dargestellt, berechnet der RISKOFDERM Calculator zunächst die resultierende Expositionsrate (in µL/min) und anschließend durch Multiplikation mit der Gesamtdauer der Anwendung während einer Schicht die Beladung pro Schicht (in µL). Das Instrument stellt die Ergebnisse als Median (50. Perzentil) und als ein weiteres, vom Benutzer auszuwählendes Perzentil dar (75. Perzentil in Abbildng 1-7, aber vom Benutzer kann jeder Perzentilwert eingegeben werden). Wenn die Berechnung zu unrealistisch hohen Werten für die Beladung pro Schicht führt, erscheint ein roter Warnhinweis am Ende des Arbeitsblatts (s. die verschiedenen Warnungen in Abbildung 1-7). Das Instrument warnt den Benutzer zudem, wenn eine „unrealistische“ Verknüpfung von Ausbringrate und Dauer erfolgt. In dem Beispiel in Abbildung 1-7 wird eine hohe Ausbringrate mit einer langen Dauer kombiniert, was zu einem orangefarbenen Warnhinweis führt. Hierbei ist zu beachten, dass beide Eingangswerte innerhalb des Validitätsbereichs des Modells liegen (die in blauer Farbe am rechten Rand des Arbeitsblattes angegeben werden), erst die Kombination der beiden wird vom Modell nicht mehr abgedeckt.

Durch Klicken auf die rote Schaltfläche „Overview results“ wird ein neues Arbeitsblatt mit neuem Namen (z.B. „Dispersion results“ für eine Berechnung mit DEO-Einheit 3) geöffnet, das die Eingangsparameter zusammenfasst und die Ergebnisse tabellarisch in Form voreingestellter Perzentile ausweist. Hierbei werden, wenn notwendig, auch Warnhinweise zu unrealistischen Schätzwerte ausgewiesen. Die Verteilung wird auch graphisch in einem Standarddiagramm dargestellt. Der Benutzer kann zu dem entsprechenden prozessspezifischen Arbeitsblatt, das immer noch im Register sichtbar ist, zurückgehen. Wenn Eingangsparameter geändert werden, so werden die Werte im Arbeitsblatt „Overview results“ automatisch neu berechnet. Als letzter Schritt kann das Arbeitsblatt „Overview results“ mittels der Schaltfläche „Print“ ausgedruckt werden. Allerdings ist es zweckmäßiger, die Druckfunktion über das Menü „Datei“ mit ihrer Vorschaufunktion zu verwenden, um so das Seitenlayout anzupassen.

Berechnungen für andere DEO-Einheiten folgen im Prinzip dem gleichen Muster und erfordern lediglich andere Eingangsparameter.

Diskussion der Eignung/Verwendbarkeit

Es muss betont werden, dass das Instrument die dermale Exposition gegenüber einem Gemisch abschätzt und dass die Exposition gegenüber einzelnen Stoffen gesondert berechnet werden muss. Dieser Schritt kann jedoch in die MS EXCEL®-Datei integriert werden, indem man ein neues Arbeitsblatt anlegt, in dem die entsprechenden Ergebnisse mit dem Anteil des Inhaltsstoffs in dem Gemisch multipliziert werden (da in dem Instrument alle Zellen geschützt sind, erfordert dies allerdings einige Erfahrung mit MS EXCEL®).

Der Zellschutz führt auch zu anderen Problemen. Erstens gibt das prozessspezifische Arbeitsblatt die Ergebnisse mit 3 signifikanten Stellen aus (z.B. 0,363 µL/min für den Median und 23400 µL/min für das obere Perzentil), die im entsprechenden Arbeitsblatt „Overwiew results“ als natürliche Zahlen formatiert werden (0 und 23374 µL/min in diesem Beispiel). Dies wird als nicht sinnvoll angesehen, kann durch den Benutzer aber nicht geändert werden. Zweitens können Arbeitsblätter nicht in die Zwischenablage kopiert und in anderen Programmen, wie beispielsweise MS WORD®, verwendet werden. Zwar existiert wiederum eine provisorische Lösung, doch erfordert auch die einige Kenntnisse in MS EXCEL®.

Des Weiteren berücksichtigt der RISKOFDERM Calculator (obwohl es ein Instrument der höheren Stufe ist) keine persönliche Schutzausrüstung und schätzt nur die potentielle dermale Exposition ab (Kapitel 1.1.1 oben). Der Beitrag einer persönlichen Schutzausrüstung zur Expositionsminderung muss deshalb separat bewertet werden. Da sowohl eine Exposition der Hände als auch eine Exposition des Körpers in den meisten DEO-Einheiten berechnet werden, kann der zusätzliche Beitrag der persönlicher Schutzausrüstung bewertet werden. Beispielsweise könnte es ausreichend sein nur Schutzhandschuhe vorzusehen, wenn die Exposition der Hände sehr viel höher ist als die des Körpers.

Das Instrument erlaubt nicht die Kombination der Abschätzungen für verschiedene Tätigkeiten (z.B. Mischen (DEO-Einheit 1) und Streichanwendung (DEO-Einheit 3)) zu einer Abschätzung über die gesamte Schicht. Eine Addition der verschiedenen Expositionsabschätzungen würde eine Entfernung des Stoffes zwischen den Tätigkeiten (beispielsweise durch Händewaschen oder unbeabsichtigt) nicht berücksichtigen und könnte auch zu einer Überschätzung führen, wenn 90. Perzentile kombiniert werden.

1.2.5.3 Weitere Instrumente

Es gibt eine Reihe weiterer Instrumente, die für spezifische Zwecke genutzt werden können. Beispielsweise kann das Programm **SprayExpo**, ursprünglich zur Bewertung der Exposition gegenüber Biozidprodukten bei Sprühapplikationen entwickelt, ein nützliches Instrument für diese Arten der Anwendung sein. Es kann zusammen mit einem Handbuch und Hintergrundinformationen von der Website der Bundesanstalt für Arbeitsschutz und Arbeitsmedizin heruntergeladen werden.[5]

1.2.6 Effizienz von Risikomanagement-Maßnahmen

Die oben diskutierten Modelle zur Expositionsabschätzung berücksichtigen bestenfalls nur einige Arten von Risikomanagement-Maßnahmen. Daher müssen Ergebnisse der Expositionsabschätzung möglicherweise modifiziert werden, um die Effizienz von Risikomanagement-Maßnahmen einzuschließen, die im Expositionsszenario beschrieben werden. (In der Praxis ist es letztlich entscheidend, dass diese Maßnahmen auch tatsächlich mit einem hohem Wirkungsgrad umgesetzt werden!)

Angaben zur Effizienz von Risikomanagement-Maßnahmen stehen in einer Reihe von Quellen zur Verfügung, eine umfassende Zusammenstellung der Informationen liegt aber noch nicht vor. Die “Library on Risk Management Measures (RMM Library, (http://www.cefic.be/Templates/ shwStory.asp?NID=494&HID=645), die im “REACH Implementation Project 3.2” entwickelt wude, enthält einige Daten zur Effizienz von einzelnen Risikomanagement-Maßnahmen, bedarf aber der Weiterentwicklung. In der „RMM Library“ werden für gewöhnlich zwei Werte für die Effizienz angegeben: ein „typischer Default-Wert“ (Schätzung des 50. Perzentils) und ein „maximal erreichbarer Wert“ (unter Anwendung von „best practice“). Weitere Informationen zum Einsatz der „RMM Library“ sind in ECHA CSA 2008 (Teil D, Kapitel 4.6.2) enthalten.

Angaben zur Effizienz von Maßnahmen zum Schutz vor einer inhalativen Exposition sind beispielsweise auch verfügbar in:

5 http://www.baua.de/nn_5846/sid_9B24F7C4CE6FCC592C8444B19869EE42/de/Publikationen/Fachbeitraege/Gd35.html?__nnn=true

- BGR 190 (BG Regel 190 der Berufsgenossenschaften; BGFE 2004); in diesem Dokument wird die Effizienz der Schutzausrüstung bei inhalativer Exposition üblicherweise als der Faktor ausgedrückt, um den die Expositionskonzentration den Arbeitsplatzgrenzwert überschreiten darf, wenn die Ausrüstung getragen wird,
- die neuen „Technical Notes for Guidance" für die Exposition des Menschen gegenüber Biozidprodukten (EC 2008) enthalten ebenfalls die Faktoren aus BGR 190, zusammen mit britischen und US-amerikanischen Standards,
- Marquart et al. (2008) haben in ihrer Publikation die Faktoren für den Schutz bei inhalativer Exposition aufgeführt, die im „Stoffenmanager" verwendet wurden,
- Fransman et al. (2008) beschreiben systematische Bemühungen zur Sammlung von Daten zur Effizienz von RMM und zum Aufbau einer „Exposure Control Efficacy Library (ECEL)".

Zur Abschätzung der Verminderung der systemischen Exposition nach dermalem Kontakt durch geeignete persönliche Schutzausrüstung am Arbeitsplatz wird häufig ein Default-Faktor von 90% verwendet (TNO 2007). Default-Werte für Schutzmaßnahmen bei dermalem Kontakt sind auch in den „Technical Notes for Guidance" für die Exposition des Menschen gegenüber Biozidprodukten (EC 2008) enthalten, die Faktoren für die mit der jeweiligen Maßnahme verbundene prozentuale Expositionsminderung bereitstellen. (Für Toxizitätsendpunkte wie Reizwirkung, Ätzwirkung oder Sensibilisierung muss eine qualitative Risikobeschreibung vorgenommen werden. Dies wird im nachfolgenden Kapitel beschrieben).

1.3 Risikobeschreibung

Wie in Kapitel 3.1.1, Teil I des Praxisführers erläutert, werden Angaben zur Exposition im Abschnitt zur Risikobeschreibung des Stoffsicherheitsberichts mit den Gefährdungsdaten des Stoffes verglichen. In diesem Schritt werden die Expositionsabschätzungen mit den Dosiswerten, die keinen (oder nur geringen) Anlass zur Besorgnis bieten (d.h. DNELs, „derived no effect levels", oder DMELs, „derived minimum effect levels", für Stoffe ohne Schwellenwert), verglichen. Dieser Prozess, der in hohem Maße Expertenwissen und -erfahrung erfordert, wird hier nur allgemein beschrieben. Eine detailliertere Beschreibung des Vorgehens findet der Leser in ECHA CSA 2008 (Teil E).

Die Risiken für den Menschen werden als angemessen beherrscht angesehen, wenn

RCR („risk characterisation ratio") = Exposition / DNEL < 1,

d.h. der DNEL liegt oberhalb der Exposition.

Im Falle von Stoffen ohne Schwellenwert-Effekte, für die ein DMEL angeleitet wurde, zeigt eine Exposition unterhalb des DMEL ein niedriges, tolerierbares Risiko an. DNELs/DMELs sollten für alle kritischen Endpunkte und Pfade abgeleitet werden.

Wenn die Exposition gegenüber einem Stoff in einer bestimmten Situation über mehrere Expositionspfade erfolgt, sollte die kombinierte Exposition berücksichtigt werden. Dies kann zum einen dadurch geschehen, dass alle Expositionen (als Körperdosen) aufaddiert werden und die Gesamtexposition mit dem geeigneten DNEL verglichen wird. Zum anderen können die für einzelne Pfade berechneten RCRs addiert werden.

In einigen Fällen liegen möglicherweise Angaben zu den toxischen Effekten für einige Endpunkte vor, es existieren aber keine Daten, die die Ableitung eines DNEL oder DMEL erlauben. ECHA CSA 2008 (Teil E, Kapitel 3.4.1) führt hierzu die akute Toxizität, Reizung/Ätzwirkung (Haut und Auge), Sensibilisierung, Mutagenität und Kanzerogenität an. In diesem Fall muss eine qualitative Risikobeschreibung mit dem Ziel erfolgen, eine angemessene Beherrschung der Risiken darzulegen. Eine Anleitung, wie eine solche Bewertung erfolgen kann, ist in ECHA CSA 2008 (Teil E) zu finden.

1.4 Kommunikation der Ergebnisse in den Expositionsszenarien

Die Risikobeschreibung führt zu einer Beschreibung der Verwendungsbedingungen (Anwendungsbedingungen und Risikomanagement-Maßnahmen), unter denen eine sichere Verwendung des Stoffes erreicht werden kann. Diese Verwendungsbedingungen bilden einen wesentlichen Teil des Expositionsszenarios, das in der Lieferkette zu kommunizieren ist.

Die Angaben des ES müssen von dem nachgeschalteten Anwender für die Prüfung verwendet werden, ob seine Verwendung des Stoffes innerhalb der vom Registranten berücksichtigten Verwendungsbedingungen liegt („compliance check“). Der Registrant kann dem nachgeschalteten Anwender als Teil des ES „Scaling“-Methoden an die Hand geben. „Scaling“-Methoden sind einfache Gleichungen, durch deren Anwendung der nachgeschaltete Anwender zeigen kann, dass er innerhalb der Bedingungen des ES handelt, selbst wenn (einige) seine(r) Anwendungsbedingungen von den durch den Registranten beschriebenen abweichen. Scaling und hierfür entwickelte Hilfsmittel werden im Teil I des Praxisführers im Kapitel 7.7 beschrieben.

Es muss beachtet werden, dass die Anwendung von „Scaling“-Methoden nur dann möglich ist, wenn der Registrant die entsprechenden Gleichungen sowie eine transparente Beschreibung seiner Expositionsabschätzung bereitstellt.

Lineare Korrelationen stellen die am einfachsten anzuwendenden „Scaling“-Regeln dar. Beispiele für Parameter, die linear mit der Exposition korreliert sind, können sein (dies kann aber vom ES und dem Expositionsmodell abhängen):

- Stoffmenge,
- Konzentration des Stoffes in dem verwendeten Gemisch,
- Effizienz verschiedener Formen örtlicher Absaugung (in Prozent).

Ein „Scaling“ nicht-linear korrelierter Parameter verlangt üblicherweise die Anwendung komplizierterer Expositionsmodelle oder anderer Instrumente, die eindeutig beschrieben und vom Registranten zur Verfügung gestellt werden sollten, wenn er entsprechende „Scaling“-Regeln vorschlägt.

Als eine „Scaling“-Regel kann der Registrant auch erläutern, wie die Expositionskonzentration abgeschätzt wurde, und das für die Abschätzung verwendete Modell/den Algorithmus angeben. In diesem Fall ist es dem nachgeschalteten Anwender möglich, den selben Algorithmus mit modifizierten Eingangsparametern anzuwenden und zu überprüfen, ob die Expositionsabschätzung unter seinen Bedingungen immer noch unterhalb des vom Registranten genannten DNELs liegt.

1.5 Literatur

BGFE, Berufsgenossenschaft der Feinmechanik und Elektrotechnik; 2004
BGR 190: Berufsgenossenschaftliche Regeln für Sicherheit und Gesundheit am Arbeitsplatz: Benutzung von Atemschutzgeräten, April 2004, http://www.bgbau-medien.de/site/asp/dms.asp?url=/ZH/z701/titel.htm

EC, European Commission; 2008
Human Exposure to Biocidal Products. Technical Notes for Guidance
European Chemicals Bureau, endorsed at the 25th meeting of representatives of Members States Competent Authorities for the implementation of Directive 98/8/EC concerning the placing of biocidal products on the market (19-21 June 2007), January 2008

ECETOC, European Centre for Ecotoxicology and Toxicology of Chemicals; 2004
Technical Report No. 93. Targeted Risk Assessment. Brussels, Belgium, 2004 (http://www.ecetoc.org)

Fransman, W., Schinkel, J., Meijster, T., van Hemmen, J., Tielemans, E., Goede, H.; 2008
Development and evaluation of an Exposure Control Efficacy Library (ECEL)
Annals of Occupational Hygiene, Vol. 52, 2008, S. 567-575

Marquart, H., Warren, N. D., Laitinen, J., van Hemmen, J. J.; 2006
Default values for assessment of potential dermal exposure of the hands to industrial chemicals in scope of regulatory risk assessments
Annals of Occupational Hygiene, Vol. 50, 2006, 469-489 (free full text: http://annhyg.oxfordjournals.org/cgi/reprint/50/5/469)

Marquart. H., Heussen, H., Le Feber, M., Noy, D., Tielemans, E., Schinkel, J., West, J., van der Schaaf, D.; 2008
'Stoffenmanager', a Web-Based Control Banding Tool Using an Exposure Process Model
Annals of Occupational Hygiene, Vol. 52, 2008, S. 429-441

Packroff, R., Johnen, A., Guhe, C., Görner, B., Lotz, G., Tischer, M., Kahl, A.; 2006
Easy-to-use workplace control scheme for hazardous substances. Project group “Easy-to-use workplace control scheme for hazardous substances” of the German Federal Institute for

Occupational Safety and Health, Dortmund, 2006 (http://www.baua.de/nn_18306/en/Topics-from-A-to-Z/Hazardous-Substances/workplace-control-scheme.pdf)

Tielemans, E., Noy, D., Schinkel, J., Heussen, H., van der Schaaf, D., West, J., Fransman, W.; 2008
Stoffenmanager Exposure Model: Development of a Quantitative Algorithm
Annals of Occupational Hygiene, Vol. 52, 2008, 443-454

TNO Quality of Life; 2007
TNO report V7333: Effective Personal Protective Equipment (PPE), Default setting of PPE for registration purposes of agrochemical and biocidal pesticides, Gerritsen-Ebben et al., http://www.bozpinfo.cz/priloha/euroshnet_02.pdf, Zeist, 2007

Warren, N. D., Marquart, H., Christopher, Y., Laitinen, J., van Hemmen, J. J.; 2006:
Task-based dermal exposure models for regulatory risk assessment
Annals of Occupational Hygiene, Vol. 50, 2006, 491-503 (free full text: http://annhyg.oxfordjournals.org/cgi/reprint/50/5/491)

2 Expositionsabschätzung für den Verbraucherbereich

2.1 Ziele, Grundlagen und wesentliche Parameter der Expositionsabschätzung und Risikobeschreibung für den Verbraucherbereich

Dieses Kapitel beschreibt das stufenweise Vorgehen für die Abschätzung der Exposition des Verbrauchers gegenüber Stoffen an sich, Stoffen in Gemischen (z.B. Lösemitteln in Klebstoffen) oder Stoffen in Erzeugnissen (wie Textilfarbstoffe in Kleidungsstücken). Für den speziellen Fall der Erzeugnisse lohnt es sich, zusätzlich die „Guidance on requirements for substances in articles" (ECHA Articles 2008) zu Rate zu ziehen.

ECHA CSA 2008 (Kapitel R.15.1.1) definiert alle Gemische und Erzeugnisse, für die eine Expositionsabschätzung durchführbar ist, als Verbraucherprodukte oder vereinfacht als Produkte.

Die breite Öffentlichkeit kann auf mehrere Arten gegenüber Stoffen exponiert sein, z.B.:

- gegenüber Stoffen, die von Verbrauchern verwendet werden;
- gegenüber Stoffen in Gemischen, die von Verbrauchern verwendet werden;
- gegenüber Stoffen in Erzeugnissen, die von Verbrauchern verwendet werden;
- gegenüber Stoffen zu Hause, die von Fachleuten verwendet werden;
- gegenüber Stoffen in der Innenraumluft (privat und öffentlich), die aus Baumaterialien freigesetzt werden;
- gegenüber Stoffen in öffentlich zugänglichen Bereichen;
- indirekt über die Umwelt.

Einige der grundlegenden Vorstellungen (z.B. hinsichtlich der Expositionspfade) und die expositionsbestimmenden Größen wurden bereits in Bezug auf die berufliche Exposition

beschrieben. Die Expositionsabschätzung für Verbraucher unterscheidet sich jedoch in mehreren wichtigen Aspekten von der beruflichen Exposition. Die folgende Liste beschreibt einige der Punkte, die bei der Bewertung der Verbraucherexposition zu berücksichtigen sind:

- Bestimmte Bevölkerungsgruppen (z.B. Kinder) sind bei der Expositionsabschätzung für Verbraucher möglicherweise gesondert zu berücksichtigen, da sie sich in Art und Ausmaß der Exposition sowie ihrer Empfindlichkeit vom Durchschnitt unterscheiden können.
- Die orale Exposition stellt bei der Verbraucherexposition manchmal einen bedeutenden Pfad dar, was bei der beruflichen Exposition üblicherweise nicht der Fall ist.
- Adäquate Messwerte sind für die Verbraucherexposition seltener verfügbar. Einige Daten, z.B. aus Monitoring-Programmen der Innenraumluft, können jedoch als zusätzliche Informationen zur Plausibilitätsprüfung modellierter Schätzungen dienen. Wenn beispielsweise die inhalative Exposition gegenüber einem flüchtigen Stoff in einem Erzeugnis abgeschätzt wird und ein solches Erzeugnis in vielen Haushalten vorzufinden ist, sollten Modellschätzungen, die weit über den in der Innenraumluft gemessenen Konzentrationen liegen, auf ihre Plausibilität geprüft werden.
- Manche Verbraucherexposition tritt weniger häufig auf, so dass die Abschätzung der Kurzzeit- (Akut-) Exposition für ein einmaliges Ereignis sinnvoller sein kann (und in der Risikobeschreibung angesprochen werden sollte) als die (chronische) Langzeitexposition. Bisweilen kann ein Verbraucherprodukt zu einer akuten (Spitzen-)Exposition während der Anwendung und zu einer chronischen Exposition aufgrund von Rückständen des Produkts führen (z.B. ein Teppichshampoo). Beide Expositionen müssen separat betrachtet werden, wobei Spitzenexpositionen (z.B. über 10 Minuten) nicht (über den gesamten Tag) gemittelt werden sollten.
- Die Expositionsabschätzung im Verbraucherbereich sollte die normale Verwendung und die vernünftigerweise vorhersehbare Fehlanwendung (z.B. Überdosierung eines Geschirrspülmittels, Kauen auf einem Stift) berücksichtigen, nicht jedoch den absichtlichen Missbrauch (z.B. Verschlucken des Geschirrspülmittels).
- Anhang I der REACH-Verordnung („Allgemeine Bestimmungen für die Stoffsicherheitsbeurteilung und die Erstellung von Stoffsicherheitsberichten“) weist den Registrant an, von einer Umsetzung der im Expositionsszenario beschriebenen Risikomanagement-Maßnahmen auszugehen. Dies beinhaltet Anweisungen und Empfehlungen zur Verwendung persönlicher Schutzausrüstung durch Verbraucher. Nach Ansicht der zuständigen Behörden sollen primär produktintegrierte Risikomanagement-Maßnahmen, nicht jedoch an den Verbraucher kommunizierte Risikomanagement-Maßnahmen (z.B. Empfehlungen für persönliche Schutzausrüstung), in der Expositionsabschätzung berücksichtigt werden, da bei einen großen Prozentsatz der Verbraucher eine Befolgung nicht gewährleistet werden kann (De Bruin et al. 2007). ECHA CSA 2008 (Kapitel R.15.3)

weist ebenfalls darauf hin, dass "effective risk management measures for consumers are usually product-integrated measures (e.g. concentration limits, package size)".

- Stoffe können durch eine Vielzahl von Mechanismen aus Erzeugnissen emittiert werden, z.B. Verdampfung, Auslaugung in Speichel oder Schweiß, Diffusion in die Haut oder durch Abnutzung (Info-Box 5).
- Einige dieser Charakteristika können zusammentreffen, beispielsweise das in den Mund nehmen („mouthing") von Erzeugnissen (Spielzeug) durch bestimmte Bevölkerungsgruppen (Kleinkinder) mit der Folge einer oralen Exposition, die für andere Bevölkerungsgruppen nicht zu berücksichtigen ist.

Info-Box 5

Die folgenden, ECHA CSA 2008 entnommenen Fragen können als Hilfestellung dienen, Expositionspfade aus Erzeugnissen zu identifizieren.

- Kann das Erzeugnis unbeabsichtigt in den Mund genommen werden (z.B. Kauen) oder ist das Erzeugnis dazu bestimmt?
- Besteht dermaler Kontakt mit dem Erzeugnis, z.B. bei Textilien, Gürteln, Schuhen etc.?
- Kann das Erzeugnis oder Teile oder Partikel davon verschluckt werden?
- Können Substanzen aus dem Erzeugnis verdampfen und somit inhaliert werden (basierend auf Default-Freisetzungsraten oder gemessenen Werten)?
- Kann das Erzeugnis die Substanz freisetzen, z.B. durch Abrieb, Sägen, Handhabung oder Erhitzung, und somit zu einer Exposition gegenüber Stäuben oder Rauch führen?

Der Augenkontakt mit Substanzen in Erzeugnissen wird gewöhnlich nicht als relevanter Pfad angesehen, muss aber möglicherweise angesprochen werden, wenn augenreizende Substanzen absichtlich aus dem Erzeugnis freigesetzt werden.

2.2 Wie wird die Verbraucherexposition abgeschätzt?

2.2.1 Verwendung von Instrumenten zur Expositionsabschätzung – Stufe 0

In ECHA CSA 2008 (Kapitel R.15.4) werden einfache Gleichungen (zur Verwendung in Tabellenkalkulationen) für die Expositionsabschätzung im Verbraucherbereich aufgeführt, die als Stufe 0 angesehen werden können.

Allgemein können zur Abschätzung der Verbraucherexposition gegenüber Stoffen aus Erzeugnissen (ECHA CSA 2008, Kapitel R.17) oder gegenüber den Stoffen selbst und Stoffen

in Gemischen (Kapitel R.15) die gleichen Expositionsgleichungen und -modelle verwendet werden. Die Freisetzung von Stoffen aus Erzeugnissen wird oftmals vermindert sein, beispielsweise durch die Einflüsse einer festen Matrix. Dies wird üblicherweise jedoch nicht in der Stufe 0 berücksichtigt (s. folgendes Kapitel 2.2.4).

Die Expositionsabschätzung der Stufe 0 stellt im Wesentlichen eine sehr grobe Betrachtung unter „worst case"-Annahmen (unmittelbare Freisetzung des Stoffes ohne jeglichen Abzug) dar. Wenn unter diesen Bedingungen eine sichere Verwendung gezeigt werden kann, ist eine Bewertung mit Instrumenten höherer Stufe nicht notwendig. Zurzeit existieren für den Verbraucherbereich keine Instrumente, die als vollständig validiert angesehen werden können.

Die Eingangsparameter für die folgenden Gleichungen sind im Allgemeinen spezifisch für das betrachtete ES. Dies trifft beispielsweise auf die Produktmenge und den Anteil des Stoffes in einem Gemisch zu. Für das Körpergewicht und die Hautoberfläche stehen allerdings Default-Werte zur Verfügung. Darüber hinaus stellt ECHA CSA 2008 (Anhang R.15-4) einige Werte für Raumvolumina bereit. Diese Daten sind in Anhang 4.2 aufgeführt.

2.2.1.1 Inhalative Exposition

Eine sehr einfache „worst case"-Gleichung zum Screening nach Stufe 0 nimmt an, dass

- Der Stoff im Produkt sofort vollständig freigesetzt wird (ohne Berücksichtigung stoffspezifischer physikalisch-chemischer Eigenschaften) und dass
- keine Lüftung vorgenommen wird.

Die Gleichung kann auf die Freisetzung eines Stoffes als Gas oder Partikel aus einem Produkt (d.h. einem Gemisch oder einem Erzeugnis) angewendet werden und liefert die Stoffkonzentration in der Luft.

$$C_{inh} = \frac{Q_{prod} \times Fc_{prod}}{V_{room}}$$

mit

C_{inh} Konzentration des Stoffes im Raum [mg/m^3]

Q_{prod} Menge des verwendeten Produkts [kg]

Fc_{prod} Gewichtsanteil des Stoffes im Produkt [mg/kg$_{prod}$]

V_{room} Raumvolumen [m^3]

Anmerkung:
Die Einheiten der Parameter in dieser und den folgenden Gleichungen weichen von denen in ECHA CSA 2008 (Kapitel R.15.4.1.1) ab, um üblichere Einheiten bei den Ergebnissen zu erhalten (z.B. mg/m^3 statt kg/m^3 für die inhalative Exposition). Die Bezeichnungen der Parameter wurden unübersetzt aus dem englischen Original übernommen.

Das folgende Beispiel veranschaulicht die Anwendung der obigen Gleichung.

Beispiel:

Als Szenario dient das Anstreichen eines Objektes mit 500 mL einer Farbe, die 20 Gew.-% des flüchtigen Stoffes X enthält. In diesem Fall (flüssiges Gemisch) ist die Dichte des Gemisches zu berücksichtigen, die laut Sicherheitsdatenblatt 1,43 g/mL beträgt. Die Menge der verwendeten Farbe (Q_{prod}) ist somit (500 mL x 1,43 g/mL =) 0,715 kg. Der Gewichtsanteil des Stoffes X in der Farbe beträgt (20 g /100 g =) 200 000 mg/kg_{prod}.

Die Anwendung erfolgt in einem Hobbyraum. Wenngleich Anhang 4.2-2 (und Anhang R. 15-4 in ECHA CSA 2008) keine für diesen Raumtyp spezifischen Angaben enthalten, erscheint ein Wert von 16 m^3 (Schlafzimmer) vernünftig (5,3 m^2 bei einer Höhe von 3 m).

Die Exposition gegenüber Stoff X kann somit abgeschätzt werden zu:

$$C_{inh} = \frac{Q_{prod} \times Fc_{prod}}{V_{room}}$$

$$C_{inh} = \frac{0{,}715\ kg \times 200\ 000\ mg/kg}{16\ m^3}$$

$$C_{inh} = 8938\ mg/m^3$$

Dieser Wert wird auf 8900 mg/m^3 gerundet.

Info-Box 6

Wenn die einatembare oder lungengängige Fraktion bekannt ist, sollte sie berücksichtigt werden. ECHA CSA 2008 (Kapitel R.15) stellt eine Gleichung (Gleichung 15-2) zur Verfügung, um die aus der Inhalation der lungengängigen Fraktion resultierende Körperdosis zu berechnen. Ferner werden Ratschläge gegeben, wie die orale Exposition, die aus dem Verschlucken der nicht-lungengängigen Fraktion resultiert, berechnet und die gesamte systemische Exposition aus Inhalation und oraler Aufnahme abgeschätzt werden kann.

Die produktspezifischen Eingangsparameter Q_{prod} und Fc_{prod} werden dem Registranten zur Verfügung stehen und Raumvolumina können Anhang 4.2-2 entnommen werden, wenn das ES sich auf eine Anwendung in einer bestimmten Umgebung bezieht (z.B. in einer Küche oder einem Badezimmer).

In einigen Fällen (z.B. wenn akute Effekte auf den Atemtrakt Anlass zur Besorgnis geben) wird die Art der Exposition besser durch eine kurzzeitige Spitzenexposition (über wenige

Minuten) in der unmittelbaren Umgebung des Anwenders abgebildet. In diesen Fällen kann das Raumvolumen auf beispielsweise 1 oder 2 m^3 reduziert werden.

Die berechnete Stoffkonzentration wird im Standardfall mit dem Langzeit-DNEL und im letzteren Fall (Spitzenexposition) mit dem Kurzzeit-DNEL verglichen.

2.2.1.2 Dermale Exposition

Die Abschätzung der dermalen Exposition nach Stufe 0 unterscheidet zwei verschiedene Szenarien:

- Dermales Szenario A: sofortige Applikation eines Stoffes in einem Gemisch.
- Dermales Szenario B: Migration eines nicht-flüchtigen Stoffes aus einem Erzeugnis.

Es ist wichtig sich zu vergegenwärtigen, dass die dermale Expositionsabschätzung zu einer dermalen Beladung (ausgedrückt als mg/cm^2 Haut), die für lokale Effekte relevant ist, oder zu einer dermalen Dosis (ausgedrückt als mg/kg Körpergewicht und Tag), die für systemische Effekte relevant ist, führen kann. Beide werden als Werte der äußeren Exposition berechnet, d.h. die Resorption durch die Haut – wenngleich für die Bewertung systemischer Effekte bedeutend – bleibt in diesem Schritt unberücksichtigt.

Wie bereits bei der beruflichen Exposition beschrieben, üben einige Stoffe primär lokale Effekte aus, wie beispielsweise Haut- oder Augenreizung, Ätzwirkung oder Hautsensibilisierung. In diesen Fällen können eine Quantifizierung der Effekte und die Ableitung von DNELs schwierig sein. Die dermale Expositionsabschätzung ist dann möglicherweise wenig sinnvoll und es sollte eine qualitative Risikobeschreibung zur Ermittlung geeigneter Risikomanagement-Maßnahmen durchgeführt werden.

Dermales Szenario A: sofortige Applikation eines Stoffes in einem Gemisch

Die für dieses Szenario verwendete Gleichung ist der für die inhalative Exposition (s.o.) verwendeten sehr ähnlich. Die Berechnung nimmt eine vollständige Auftragung des Stoffes in dem Gemisch auf die Haut an, was eindeutig eine „worst case"-Annahme darstellt.

$$L_{der} = \frac{Q_{prod} \times Fc_{prod}}{A_{skin}}$$

mit

L_{der}	Dermale Beladung: Stoffmenge auf der Hautfläche pro Ereignis [mg/cm^2]
Q_{prod}	Menge des verwendeten Produkts [mg]
Fc_{prod}	Gewichtsanteil des Stoffes im Produkt [-]
A_{skin}	Oberfläche der exponierten Haut [cm^2]

Wiederum werden die produktspezifischen Eingangsparameter dem Registrant zur Verfügung stehen. Die exponierte Hautoberfläche erfordert:

- eine Beurteilung der exponierten Körperteile: dies sollte in vielen Fällen aus der Art des Gemisches ableitbar sein (z.B. Fingerspitzen, wenn eine Klebstofftube verwendet wird).
- Daten zur Oberfläche dieser Körperteile: s. Anhang 4.2-1.

Das folgende Beispiel veranschaulicht die Anwendung der obigen Gleichung.

Beispiel:

Das Szenario ist die Anwendung eines Tubenklebstoffs. Die Exposition gegenüber einem Additiv Z, das im Klebstoff mit einer Konzentration von 0,5 Gew.-% (Fc_{prod} = 0.005) enthalten ist, soll bewertet werden. Die verwendete Produktmenge (Q_{prod}) sollte aus dem ES bekannt sein. Wenn spezifische Werte nicht zur Verfügung stehen, kann das entsprechende ConsExpo „Fact sheet“ relevante Daten liefern. Für dieses Beispiel nimmt das ConsExpo „Fact sheet“ für Heimwerkerprodukte (ter Berg et al. 2007) einen Wert von 0,08 g (80 mg) für Tubenklebstoff an und dieser Wert wird hier verwendet.

Weiterhin wird angenommen, dass nur eine Exposition der Fingerspitzen erfolgt. Die Hautoberfläche der Fingerspitzen (A_{skin}) ist nicht in Anhang 4.2-1 enthalten und Anhang R.15.4 („Data references“) in ECHA CSA 2008 enthält ebenfalls keine Daten. Wiederum stellt das ConsExpo „Fact sheet“ eine nützliche Quelle dar und der Wert von 2 cm^2, von ter Berg et al. (2007) für Fingerspitzen im Tubenklebstoff-Szenario berichtet, wird verwendet.

$$L_{der} = \frac{Q_{prod} \times Fc_{prod}}{A_{skin}}$$

$$L_{der} = \frac{80 \text{ mg} \times 0{,}005}{2 \text{ cm}^2}$$

$$L_{der} = 0{,}2 \text{ mg/cm}^2$$

Für andere Szenarien wird möglicherweise die Beladung pro Tag (und nicht pro Ereignis) benötigt. Beispielsweise schlugen Api et al. (2008) kürzlich einen Ansatz für eine quantitative Risikobeschreibung hautsensibilisierender Stoffe vor, in dem die Exposition des Verbrauchers als Masse pro cm^2 Haut pro Tag ausgedrückt wird. Diese tägliche dermale Beladung kann mit der obigen Gleichung einfach durch Multiplikation mit der Anzahl der Ereignisse pro Tag berechnet werden, wenn mehr als ein Ereignis pro Tag auftreten.

Wenn systemische Effekte zu berücksichtigen sind, muss die dermale Dosis nach folgender Gleichung berechnet werden:

$$D_{der} = \frac{Q_{prod} \times Fc_{prod} \times n}{BW}$$

mit

D_{der}	Dermale Dosis: potentiell aufgenommene Stoffmenge [mg/kg Körpergewicht und Tag]
Qprod	Menge des verwendeten Produkts [mg]
Fcprod	Gewichtsanteil des Stoffes im Produkt [-]
n	Durchschnittliche Anzahl der Ereignisse pro Tag [1/d]
BW	Körpergewicht [kg]

Beispiel:

Das obige Beispiel wird zur Berechnung der dermalen Dosis weitergeführt. Das Körpergewicht (BW) wird Anhang 4.2.1 entnommen (65 kg). Der einzige fehlende Parameter ist die durchschnittliche Anzahl der Ereignisse (n), die aus dem ES bekannt sein kann. Eine alternative Quelle stellen die ConsExpo „Fact sheets“ dar. Das „Fact sheet“ für Heimwerkerprodukte (ter Berg et al. 2007) gibt für die Verwendung von Tubenklebstoffen einen Wert von 1 Ereignis pro Woche (0,14 Ereignisse pro Tag) an (das Ergebnis ist die tägliche Dosis gemittelt über eine Woche).

$$D_{der} = \frac{Q_{prod} \times Fc_{prod} \times n}{BW}$$

$$D_{der} = \frac{80 \text{ mg} \times 0{,}005 \times 0{,}14/\text{d}}{65 \text{ kg}}$$

$$D_{der} = 0{,}0009 \text{ mg/kg} \times \text{d}$$

Die durchschnittliche Anzahl der Ereignisse pro Tag wird in dem betrachteten, spezifischen ES verfügbar sein. Mitunter kann sie aber auch aus anderen Quellen abgeleitet werden (s. Beispiel in Box 7).

Info-Box 7

ECHA CSA 2008 (Kapitel R.15.4.1.2) enthält Anleitungen wie die Exposition zu berechnen ist, wenn die Substanz in einem flüssigen Gemisch enthalten ist, die weiter verdünnt wird. Die entsprechenden Gleichungen können auch für einige weitere spezifische Fälle verwendet werden, z.B. eine flüchtige Substanz in einem flüchtigen Medium.

Dermales Szenario B: Migration eines nicht-flüchtigen Stoffes aus einem Erzeugnis

Der grundlegende Unterschied zwischen diesem Szenario und dem oben diskutierten dermalen Szenario A besteht darin, dass hier *Erzeugnisse* betrachtet werden und, als solches, nicht der gesamte Stoff mit der Haut in Berührung kommen wird. Die Hauptaufgabe besteht dann darin, den Anteil des Stofffes abzuschätzen, der bei Hautkontakt aus einem Erzeugnis (z.B. Kleidungsstücken) innerhalb von 24 Stunden (Default für Screening nach Stufe 0) migrieren wird. Im Vergleich mit den bisher diskutierten Szenarien sind die Berechnungen komplexer und erfordern mehr Parameter.

Die dermale Beladung wird für dieses Szenario mit folgender Gleichung berechnet:

$$L_{der} = \frac{Q_{prod} \times Fc_{prod} \times Fc_{migr} \times F_{contact} \times T_{contact}}{A_{skin}}$$

mit

L_{der} Dermale Beladung: Stoffmenge auf der Hautfläche pro Ereignis [mg/cm^2]

Q_{prod} Menge des verwendeten Produkts [mg]

Fc_{prod} Gewichtsanteil des Stoffes im Produkt [-]

Fc_{migr} Migrationsrate: Anteil des Stoffes, der pro Stunde in die Haut migriert [mg/mg h]

$F_{contact}$ Anteil der Kontaktfläche der Haut: das Erzeugnis ist nur teilweise mit der Haut in Kontakt [m^2/m^2]

$T_{contact}$ Kontaktdauer [h]

A_{skin} Oberfläche der exponierten Haut [cm^2]

$F_{contact}$ wird als Default gleich 1 gesetzt (ECHA CSA 2008, Kapitel R.15.4.1.2) und wird hier nicht weiter betrachtet. Von den beiden bisher noch nicht besprochenen Parametern (Fc_{migr} und $T_{contact}$) stehen Angaben zur Kontaktdauer möglicherweise im ES zur Verfügung. Die Migrationsrate Fc_{migr} hängt von verschiedenen Faktoren ab, z.B. der Matrix des Erzeugnisses. Auf Basis der bekannten Eigenschaften des Produktes sollte eine „worst case“-Schätzung der Migrationsrate abgeleitet werden. Alternativ können Modelle der höheren Stufe eingesetzt werden.

Das folgende Beispiel veranschaulicht die Anwendung der obigen Gleichung mittels einer Modellberechnung, die vom BfR (2007) durchgeführt wurde.

Beispiel:

Das betrachtete Szenario ist die Exposition gegenüber einem Textilfarbstoff, der in einem Kleidungsstück mit einer Konzentration von 10 g/kg enthalten ist. Alle Eingangswerte sind BfR (2007) entnommen.

Q_{prod} und Fc_{prod} liegen nicht separat vor, können aber wie folgt berechnet werden: das Flächengewicht des Kleidungsstücks (100 g/m^2) und die Hautfläche (1 m^2) resultieren in 100 g Kleidungsstück, das 10 g/kg des Farbstoffs enthält, d.h. 1 g des Farbstoffs in dem Kleidungsstück. Es ist zu beachten, dass der Ausdruck Q_{prod} x Fc_{prod} in vielen Fällen zur Berechnung der Stoffmenge in einem Erzeugnis nützlich ist, dass er aber ersetzt werden kann, wenn die Stoffmenge bekannt ist oder auf anderem Wege, wie in diesem Beispiel, berechnet werden kann.

Die Migrationsrate wird mit 0,5% bei einer Kontaktdauer ($T_{contact}$) von 16 Stunden angegeben (0.5 mg/100 mg x 16 h). $F_{contact}$ wird zu 1 gesetzt (s.o.).

$$L_{der} = \frac{Q_{prod} \times Fc_{prod} \times Fc_{migr} \times F_{contact} \times T_{contact}}{A_{skin}}$$

$$L_{der} = \frac{1000 \text{ mg} \times 0{,}5 \text{ mg} \times F_{contact} \times 16 \text{ h}}{100 \text{ mg} \times 16 \text{ h} \times 1 \text{ m}^2}$$

$$L_{der} = \frac{5 \text{ mg}}{\text{m}^2}$$

Das Ergebnis kann umgerechnet werden zu:

$$L_{der} = 0.5 \ \mu\text{g/cm}^2$$

Die dermale Dosis wird aus der dermalen Beladung berechnet:

$$D_{der} = \frac{L_{der} \times A_{skin} \times n}{BW}$$

mit

D_{der} Dermale Dosis: potentiell aufgenommene Stoffmenge [mg/kg Körpergewicht und Tag]
L_{der} Dermale Beladung: Stoffmenge auf der Hautfläche pro Ereignis [mg/cm^2]
A_{skin} Oberfläche der exponierten Haut [cm^2]
N Durchschnittliche Anzahl der Ereignisse pro Tag [1/d]
BW Körpergewicht [kg]

Bei beiden dermalen Szenarien ist es wichtig zu beachten, dass die dermale Beladung (in mg/cm^2) für ein Ereignis berechnet und üblicherweise mit dem akuten DNEL für lokale Effekte verglichen wird, der in der gleichen Einheit angegeben wird (s. ECHA CSA 2008, Kapitel R.8.1).

Die dermale Dosis wird gewöhnlich mit dem Langzeit-DNEL für systemische Effekte verglichen, da ein akuter DNEL für systemische Effekte normalerweise für den dermalen Pfad nicht abgeleitet wird (s. ECHA CSA 2008, Kapitel R.8.1).

2.2.1.3 Orale Exposition

ECHA CSA 2008 (Kapitel R.15.4.1.3) stellt nur ein Szenario für die orale Exposition dar.

Orales Szenario A: unbeabsichtigtes Verschlucken eines Stoffes in einem Produkt während normaler Verwendung

Auf sehr einfachem Niveau wird die orale Aufnahme mit folgender Gleichung berechnet:

$$D_{oral} = \frac{Q_{prod} \times Fc_{prod} \times n}{BW}$$

mit

D_{oral} Aufnahme des Stoffes [mg/kg Körpergewicht und Tag]
Q_{prod} Menge des verwendeten Produkts [mg]
Fc_{prod} Gewichtsanteil des Stoffes im Produkt [-]
n Durchschnittliche Anzahl der Ereignisse pro Tag [1/d]
BW Körpergewicht [kg]

Diese Gleichung soll sowohl für Gemische als auch für Erzeugnisse, oder realistischer: Teile von Erzeugnissen, verwendet werden. Typische Beispiele sind das Verschlucken von (Teilen von) Erzeugnissen durch kleine Kindern (z.B. Teile, die von einem Spielzeugauto abbrechen) und abgekratztes Produktmaterial durch Kauen auf einem Stift durch Kinder und Erwachsene.

Beispiel:

Das Szenario besteht im unbeabsichtigten Verschlucken von Knetmasse durch ein Kind und der resultierenden Exposition gegenüber Stoff A, der in der Knetmasse in einer Konzentration von 1% (Fc_{prod} = 0.01) enthalten ist.

ECHA CSA 2008 (Anhang R.15-4) führt keine Körpergewichtsdaten für Kinder auf. Wiederum bietet das entsprechende ConsExpo „Fact sheet“ (Bremmer und van Veen 2002) wichtige Werte für die Eingangsparameter. Das Alter von Kindern, die mit Knetmasse spielen wird im Default zu 4,5 Jahren angenommen und das entsprechende Körpergewicht (BW) liegt bei 16,3 kg. Die durchschnittliche Anzahl der Ereignisse (n) beträgt 52/Jahr (0,14/Tag) und diese Zahl wird hier unter der „worst case“-Annahme verwendet, dass das Kind jedes Mal, wenn es mit der Knetmasse spielt, auch etwas davon verschluckt. Die verschluckte Produktmenge (Q_{prod}) wird mit 1 g angegeben (1000 mg, abgeleitet aus Produktvolumen und Dichte), wenngleich dies ein schlecht dokumentierter Schätzwert ist (Bremmer und van Veen 2002).

$$D_{oral} = \frac{Q_{prod} \text{ x } Fc_{prod} \text{ x } n}{BW}$$

$$D_{oral} = \frac{1000 \text{ mg x } 0.01 \text{ x } 0{,}14/d}{16{,}3 \text{ kg}}$$

$$D_{oral} = 0{,}086 \text{ mg/kg x d}$$

Info-Box 8

Neben dem Szenario Verschlucken können einige Artikel auch in den Mund genommen werden, ohne überhaupt verschluckt zu werden („mouthing“). In diesem Fall kann eine Substanz in den Speichel migrieren und anschließend aufgenommen werden. ECHA CSA 2008 (Kapitel R.17) schlägt die Verwendung obiger Gleichung (die vollständige Freisetzung des Stoffes annimmt) zum Screening vor oder aber die Verwendung der für das „mouthing“ durch Kinder spezifischen Daten von van Engelen et al. (2006). Bremmer und van Veen (2002) geben auch nützliche Werte für mehrere Parameter sowohl für das Szenario des direkten Verschluckens als auch für das „mouthing“ Szenario an.

ECHA CSA 2008 stellt eine weitere Gleichung zur Verfügung, die verwendet werden kann, falls der Stoff vor dem Verschlucken verdünnt wird. Außerdem kann die Gleichung auch verwendet werden, wenn die orale Aufnahme des nicht-lungengängigen Anteils inhalierter Partikel berücksichtigt werden soll (s. „Inhalative Exposition“ oben).

In den meisten Fällen wird die Expositionsabschätzung für die orale Aufnahme mit dem Langzeit-DNEL für systemische Effekte verglichen werden, da ein akuter DNEL für systemische Effekte normalerweise für den oralen Pfad nicht abgeleitet wird (ECHA CSA 2008, Kapitel R.8.1).

Es muss beachtet werden, dass die obigen Szenarien und Formeln nicht alle möglichen Szenarien der Verbraucherexposition abdecken. Beispielsweise empfiehlt ECHA CSA 2008 (Kapitel R.15.4.1.3) für in Hausstaub akkumulierende Stoffe die tatsächliche Konzentration im Hausstaub zu messen und diese zur Abschätzung der inhalativen, oralen und dermalen Exposition zu verwenden. Für die Zukunft sind generischere Szenarien für die Exposition des Verbrauchers zu erwarten.

Info-Box 9

Wenn spezifische Informationen zu einigen der in obigen Gleichungen benötigten Parametern fehlen (z.B. Anwendungshäufigkeit, Raumvolumen für bestimmte Anwendungen oder verwendete Produktmenge), ist es nützlich die Default-Datenbank der Software ConsExpo 4.1 (unten detailliert beschrieben) zu Rate zu ziehen. Sie enthält verschiedene Werte für diese Parameter (z.B. Menge verwendeten Pulvers für Geschirrspüler und “angepasste” Raumvolumina für einige Anwendungen zur Modellierung der unmittelbaren Umgebung des Anwenders). Hilfreiche Hintergrundinformationen stehen in Form der „Fact sheets“ zur Verfügung, die beispielsweise die Herkunft und Natur dieser Werte (z.B. 75. Perzentil oder 90. Perzentil) beschreiben. “Fact sheets” sind verfügbar unter: www.consexpo.nl.

2.2.2 Verwendung von Instrumenten zur Expositionsabschätzung – Stufe 1

Wie bereits bei der Expositionsabschätzung am Arbeitsplatz bemerkt (Kapitel 1.2.4.1), liegt ECETOC TRA nun als in Microsoft Excel® umgesetztes Instrument vor und beinhaltet viele Veränderungen, die detaillierter im „Technical Report“ (ECETOC 2009) beschrieben sind. Wenngleich die Exposition des Verbrauchers auch mit der oben angesprochenen integrierten Version (siehe Info-Box 1, Kapitel 1.2.4.1) abgeschätzt werden kann, wird hier das Einzelmodul ECETOC TRA für den Verbraucherbereich genauer besprochen. Ähnlich dem Instrument für den Arbeitsplatz besteht ECETOC TRA für den Verbraucherbereich aus einer einzigen MS Excel®-Datei, von der vor der Dateneingabe eine Sicherungskopie zurückbehalten werden sollte.

Verglichen mit der Vorgängerversion setzt ECETOC TRA für den Verbraucherbereich nun die Produkt- und Erzeugniskategorien („product categories“ (PC) und „article categories“ (AC)) von REACH vollständig um. Viele diese Kategorien sind weiter in Unterkategorien mit unterschiedlichen Szenarien unterteilt (die sich hinsichtlich Zielpopulation, Expositionspfad und Standard-Eingabewerten unterscheiden können). Beispielsweise beinhaltet PC31 („Poliermittel und Wachsmischungen“) die Unterkategorien

- Poliermittel, Wachse/Cremes (Boden, Möbel, Schuhe) und
- Poliermittel, Spray (Möbel, Schuhe)

Während ECETOC TRA für den Arbeitsplatz auf Prozesskategorien (PROCs, siehe Kapitel 9.3, Teil II des Praxisführers) basiert, verwendet das Instrument für den Verbraucherbereich PCs und ACs, d.h. die Produkte oder Erzeugnisse, in denen der Stoff schlussendlich verwendet wird, sind für die Expositionsabschätzung entscheidend.

Zudem wurden die in den Berechnungen verwendeten Algorithmen geringfügig überarbeitet und die Werte für die in diesen Algorithmen verwendeten Parameter geändert, teilweise substantiell (für Details siehe ECETOC 2009). Viele der grundlegenden Konzeptionen der ursprünglichen Version bleiben aber bestehen, beispielsweise:

- Das Instrument weist jeder PC und AC automatisch die relevanten Expositionspfade zu
- Die Bioverfügbarkeit eines Stoffes wird für alle Expositionspfade zu 100% angenommen
- Die Werte der Standardparameter sind mit Ausnahme von zwei Schlüsselparametern pro Expositionspfad (z.B. die pro Ereignis verwendete Stoffmenge bei inhalativer Exposition) unveränderlich
- Die systemische Exposition über alle Pfade kann für jede Unterkategorie aufaddiert werden, aber die Exposition aus verschiedenen Unterkategorien wird nicht zusammengezählt.

Nach dem Start von ECETOC TRA für den Verbraucherbereich und Akzeptieren von Makros bei einer Sicherheitswarnung, öffnet das Instrument das erste („User Input“) von acht Arbeitsblättern, zwischen denen der Anwender mittels der Registerkarten navigieren kann. Es ist hilfreich, die acht Arbeitsblätter in drei Gruppen einzuteilen:

- Eingabe (ein Arbeitsblatt)

  Das Arbeitsblatt “User Input” enthält die Abschnitte der eigentlichen Dateneingabe durch den Anwender und ist das einzige, das eine solche überhaupt gestattet.
- Ergebnisse (fünf Arbeitsblätter)

  Die Arbeitsblätter “Results by Sentinel Prod” und “Results by Prod Subcat” enthalten die Ergebnisse in Abhängigkeit davon, was in der Eingabe ausgewählt wurde („sentinel products/articles“, „product/article sub-categories“ oder beides). Diese beiden Arbeitsblätter zeigen (wenn Referenzwerte eingegeben wurden) auch die Ergebnisse der Ri-

sikocharakterisierung. Die Arbeitsblätter “Dermal (Prod Subcat)”, “Oral (Prod Subcat)” und “Inhalation (Prod Subcat)” enthalten nach Expositionspfad differenzierte Details der Abschätzung pro Unterkategorie (siehe Info-Box 10).

- Defaults (zwei Arbeitsblätter)

  Die Arbeitsblätter “Defaults” und “Defaults2” enthalten verschiedene Standardwerte, z.B. die für eine bestimmte PC- oder AC-Unterkategorie als relevant erachteten Expositionspfade und zugrunde liegende anthropometrische Parameter (z.B. Körperoberflächen).

Info-Box 10

Das Instrument ermöglicht die Expositionsabschätzung auf PC- oder AC-Ebene für spezifische Unterkategorien und/oder „Wächterprodukte“ („sub-category“ bzw. „sentinel products“). Wenn die Berechnung für „Wächterprodukte“ ausgewählt wird, erfolgt die Ergebnisausgabe für diejenige Unterkategorie, die in der höchsten Exposition resultiert. Beispielsweise kann man das „Wächterprodukt“ für PC1 („Klebstoffe, Dichtstoffe“) wählen und die Unterkategorie mit der höchsten abgeschätzten Exposition wird dann in dem Arbeitsblatt “Results by Sentinel Prod” angezeigt. Wenn die für das Wächterprodukt abgeschätzte Exposition (bei Vergleich mit dem Referenzwert) die sichere Verwendung ausweist, dann ist die sichere Verwendung auch für die entsprechenden Unterkategorien nachgewiesen. Es muss betont werden, dass das „Wächterprodukt“ für unterschiedliche Expositionspfade variieren kann. Zum Beispiel wird die orale Exposition bei PC9 nur für Kinder in den Unterkategorien „Fingerfarben“ (PC9c) und „Knetmasse“ (PC9b-3) abgeschätzt, die somit das „Wächterprodukt“ für die orale Exposition darstellen. Eine andere Unterkategorie kann für einen anderen Pfad die relevanteste sein.

Es ist auch zu beachten, dass ECETOC TRA für den Verbraucherbereich zwischen Kindern und Erwachsenen unterscheidet. Allgemein wird die Exposition entweder für Erwachsene oder für Kinder für eine bestimmte Unterkategorie abgeschätzt (z.B. wird die Exposition gegenüber Fingerfarben nur für Kinder berechnet). In einigen Unterkategorien werden allerdings beide Gruppen berücksichtigt, jedoch für verschiedene Expositionspfade. Beispielsweise wird in AC5-1 („clothing“) die orale Exposition bei Kindern, jedoch die inhalative und dermale Exposition bei Erwachsenen für relevant erachtet (siehe „Defaults“-Arbeitsblatt im Instrument für weitere Details).

Die Dateneingabe im Instrument ist aufgrund der verwendeten Farbcodierung unkompliziert. Die Zellen, die eine Dateneingabe des Anwenders erfordern sind grün, automatisch berechnete Zellen hingegen rosa hinterlegt. Grau hinterlegte Zellen können mit vom Anwender gewählten Daten befüllt werden, die allerdings erläutert und dokumentiert werden müssen (Standardwerte werden verwendet, wenn diese Zellen leer gelassen werden). Hierbei ist

allerdings nur die Eingabe bei einigen Parametern gestattet, die im Arbeitsblatt „User Input“ unter der Überschrift „Optional“ gelistet werden:

- Menge des verwendeten Produkts („amount of product used”),
- Anteil des Stoffes im Produkt/Erzeugnis (“fraction of the substance in the product/article”) und
- Hautkontaktfläche (“skin contact area“).

Anwenderspezifische Eingaben sind für diese Parameter nur möglich, wenn der entsprechende Parameter für die Expositionsabschätzung der spezifischen Unterkategorie benötigt wird. Wenn beispielsweise im Instrument nur die inhalative Exposition als relevant erachtet wird, kann die Hautkontaktfläche in dem Arbeitsblatt „User input“ nicht geändert werden.

Üblicherweise wird die Expositionsabschätzung in der folgenden Reihenfolge im Arbeitsblatt „User input“ durchgeführt (Abbildung 2-1):

- Eingabe eines Wertes für den Dampfdruck (die entsprechende Standardannahme für die Freisetzung an die Luft wird automatisch zugewiesen).
- Eingabe eines Referenzwertes (z.B. DNEL) mit den korrekten Einheiten: Referenzwert für die Inhalation in mg/m^3 oder in mg/kg x d.[6] Der “worst-case reference value” ist üblicherweise der niedrigste Referenzwert (siehe aber unten).
- Auswahl der relevanten „Wächterprodukte“ und/oder Unterkategorien (siehe Info-Box 10) durch Eingabe eines „x“ in das entsprechende Feld. Die Anzahl der gleichzeitig bewerteten „Wächterprodukte“ oder Unterkategorien unterliegt keiner Begrenzung.
- Auswahl ob es sich bei dem Produkt um ein Spray handelt, wenn dies nicht bereits als Standardannahme ausgewählt ist und wenn die entsprechende Zelle grau hinterlegt (d.h. für eine Dateneingabe verfügbar) ist. Beispielsweise kann „Spray“ für wasserbasierte Latex-Wandfarben (PC9a-1), nicht aber für Fingerfarben (PC9c) ausgewählt werden. Der Anteil, der an die Luft abgegeben wird („fraction released to air“) ist für Sprays immer 1. Er kann nicht geändert werden und überschreibt den an die Luft abgegebenen Anteil, der sich aus dem Dampfdruck ergibt.
- In einem letzten Schritt können – wenn zutreffend – die Standardwerte in den Spalten F bis K geändert werden (siehe unten). Eine solche Änderung ist nur für manche der Parameter zulässig, wie beispielsweise den Anteil des zu bewertenden Stoffes in dem Produkt/Erzeugnis („Product ingredient fraction“) und die Menge des pro Anwendung eingesetzten Produktes. Tatsächlich erfordern diese beiden Parameter oftmals pro-

[6] Technisch gesehen ist es lediglich notwendig, für den Pfad einen Referenzwert einzugeben, für den eine Expositionsabschätzung bei der gewählten PC/AC durchgeführt wird (dies kann im „Defaults“-Arbeitsblatt geprüft werden). Beispielsweise wird für PC3-1 (Luftbehandlungsprodukte, sofortige Wirkung (Aerosolsprays)) nur die inhalative Exposition für relevant erachtet, so dass nur ein inhalativer Referenzwert eingegeben werden muss. Es ist allerdings einfacher zu Beginn alle Referenzwerte einzugeben, da so Fehlermeldungen vermieden und verschiedene Produkte, die den gleichen Stoff enthalten, bewertet werden können.

dukt-spezifische Daten, da die Standardwerte sehr allgemein sind. Der Standardwert von 0,6 (60%) für den Anteil eines Stoffes in Geschirrspülmitteln (PC35-1) wird nur für einige Inhaltsstoffe zutreffend sein.

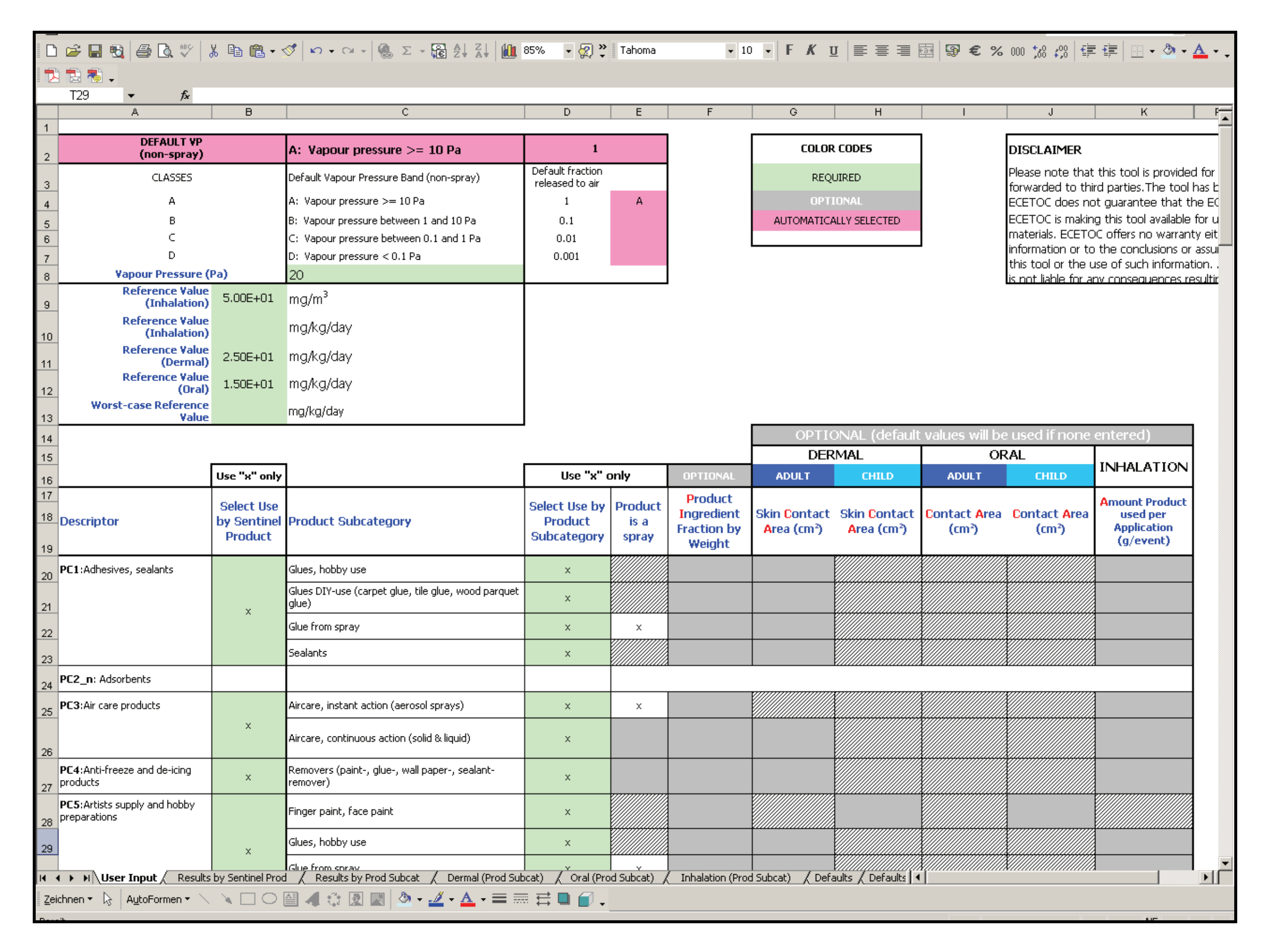


Abbildung 2-1 Druckbildschirm des Arbeitsblattes “User input” (nur die ersten PCs sind gezeigt, wobei alle “Wächterkategorien” und Unterkategorien ausgewählt sind)

Die Ergebnisse werden nach der Dateneingabe durch den Anwender automatisch berechnet und können durch Auswahl eines der fünf Ergebnis-Arbeitsblätter (siehe oben) angesteuert werden. Die Ergebnisdarstellung und das Detailniveau variiert zwischen den verschiedenen Arbeitsblättern leicht. So bietet z.B. die Ergebnisdarstellung nach „Wächterkategorie“ einen allgemeinen Überblick mit abgeschätzten Expositionen und RCRs (letztere in roter Schrift, wenn sie > 1 sind) für diejenigen PC/AC mit der höchsten Exposition (worst-case-Szenario). Sehr hilfreich ist hierbei die im oberen Arbeitsblattbereich implementierte Funktion Berechnungsdetails ein- oder auszublenden („HIDE“ bzw. „UNIHIDE“).

Die Ergebnisse nach Unterkategorie zeigen ebenso RCRs > 1 in rot an. Im Gegensatz zu den Ergebnissen nach „Wächterkategorie“ zeigt dieses Arbeitsblatt aber nicht nur alle Ergebnisse für die zur Berechnung ausgewählten Unterkategorien, sondern bietet die zusätzli-

che Information, ob das worst-case-Szenario auf einer Exposition von Erwachsenen, Kindern oder beiden Gruppen basiert. Dieser Überblick zeigt keine Berechnungsdetails an, ist aber hilfreich, z.B. um zu beurteilen ob nur eine Unterkategorie in den PC/AC hohe RCRs aufweist, während für alle anderen Unterkategorien eine sichere Verwendung gezeigt werden kann.

Schließlich unterscheiden sich die drei Arbeitsblätter mit den pfad-spezifischen Ergebnissen je Unterkategorie von den oben erwähnten Ergebnisdarstellungen indem nur die Expositionsabschätzung mit allen Details, nicht aber die Risikocharakterisierung dargestellt wird. Für ein Verständnis der Berechnungen sind sie unentbehrlich, was durch den in der Kopfzeile dargestellten Algorithmus erleichtert wird (diese Information ist über die „UNHIDE“-Funktion auch bei den Ergebnissen für die „Wächterprodukte“ zugänglich (siehe oben), aber nur für das worst-case-Szenario und nicht für alle Unterkategorien). Die Informationen können bei der Identifizierung derjenigen Parameter, die einen bedeutenden Einfluss auf die Expositionsabschätzung haben, sehr nützlich sein. Die folgende Abbildung 2-2 zeigt beispielsweise, dass die Standardwerte für die Menge an PC1-Produkten der kritischste Parameter für die inhalative Expositionsabschätzung sind (bei der abgeschätzten Konzentration sind sie alleine für die Unterschiede verantwortlich).

Descriptor	Product Subcategory	Parameter:	Product Ingredient (g/g)	Amount Product Used per Application (g/event)	FreQuency of Use (events / day)	Fraction Released to Air[1] (g/g)	Exposure Time (hr)	Inhalation Rate (m^3/hr)	Conversion Factor	Room Volume (m^3)	Body Weight (kg)	Exposure (mg/kg/day)	Exposure (mg/m^3)
		Algorithm:	(PI x	A x	FQ x	F x	ET x	IR x	1000)	/ (V x	BW)		
PC1: Adhesives, sealants	Glues, hobby use		0.3	9	1	1	4.0	1.4	1000	20	60	1.23E+01	1.35E+02
	Glues DIY-use (carpet glue, tile glue, wood parquet glue)		0.3	15000	1	1	6.0	1.4	1000	20	60	3.08E+04	2.25E+05
	Glue from spray		0.3	255	1	1	4.0	1.4	1000	20	60	3.50E+02	3.83E+03
	Sealants		0.3	390	1	1	4.0	1.4	1000	20	60	5.35E+02	5.85E+03

Abbildung 2-2 Druckbildschirm für die inhalative Expositionsabschätzung bei Produkte der PC1 (Standardwerte für die Eingabe verwendet; teilweise für eine bessere Ansicht neu formatiert).

Bei diesen Ergebnisdarstellungen haben die roten Werte nichts mit der Risikocharakterisierung zu tun, sondern heben diejenigen Parameter hervor, für die eine Eingabe durch den Anwender zulässig ist.

Info-Box 11

Dieser Praxisführer beabsichtigt nicht, die Algorithmen und Standardwerte des Instruments zu prüfen und zu diskutieren. Diese sind im „Technical Report“ (ECETOC 2009) dokumentiert. Hauptsächlich basieren die Standard-Eingangswerte auf den ConsExpo „Fact sheets“ (siehe Kapitel 2.2.3) oder Expertenwissen. Allerdings ist die Quelle/Begründung für einige Standardwerte nicht unmittelbar einleuchtend. Beispielsweise wurde eine Standard-Häufigkeit von 1 Ereignis/Tag für fast alle Unterkategorien gewählt, obwohl die als Quelle angegebenen ConsExpo „Fact sheets“ üblicherweise spezifischere Daten enthalten. Wenngleich dieser Standardwert für die meisten Verwendungen sicher konservativ ist, können einige Produkte (z.B. Geschirrspülmittel) eventuell häufiger benutzt werden. Anwender sollten die Häufigkeit im Zusammenhang des Vergleichs mit den Referenzwerten diskutieren (siehe unten).

Der neue Algorithmus für die dermale Expositionsabschätzung erfordert keinen Migrationsfaktor (siehe dermales Szenario B in Kapitel 2.2.1.2). Dies wird durch die Annahme einer (imaginären) Schicht des Produktes/Erzeugnisses erreicht, die mit der Haut in Kontakt kommt und für die die Dicke im Instrument hinterlegt ist. Das Instrument nimmt nun den vollständigen Übergang der in dieser Schicht enthaltenen Substanz an.

Wenn ein Stoff in mehreren Produkten zu bewerten ist, ist es hilfreich das Instrument für alle PC/AC und alle Unterkategorien auszuführen. Diese Herangehensweise ist auch nützlich, wenn die verfügbaren Unterkategorien einem bestimmten Produkt nicht exakt entsprechen, das Produkt aber ersatzweise durch eine andere Unterkategorie beschrieben werden kann (es ist offensichtlich, dass dies einer Prüfung und ggf. Änderung der Standardwerte bedarf). Zudem können die Abschätzungen für ähnliche Unterkategorien verglichen werden und das Vertrauen in die Expositionsabschätzung erhöhen.

Zu diesem Zweck erscheint es sinnvoll, sich eine „Standarddatei“ des Instruments herzustellen, in der alle „Wächterprodukte“ und Unterkategorien ausgewählt sind. Diese kann dann als Grundlage für die Expositionsabschätzung für verschiedene Stoffe dienen. Am Ende wird der Anwender mehrere Dateien (eine pro Stoff) mit allen Expositionsabschätzungen und RCRs haben. Soll diese Prozedur allerdings auf viele Stoffe angewendet werden, ist alternativ die Verwendung der Integrierten Version von ECETOC TRA in Betracht zu ziehen.[7]

[7] Es ist unmöglich, ein Abschneidekriterium für die Anzahl der Stoffe anzugeben, oberhalb dessen die Anwendung der Integrierten Version angezeigt ist. Als Orientierung erscheint ein Screening von 5-10 Stoffen über alle Unterkategorien in ECETOC TRA für den Verbraucherbereich nicht sehr zeitintensiv zu sein.

Diskussion der Eignung/Verwendbarkeit

ECETOC TRA für den Verbraucherbereich stellt für mehrere PCs und ACs keine Expositionsabschätzungen zur Verfügung. Diesen wird im Desriptor ein „n“ zugewiesen und sie können nicht für die Abschätzung ausgewählt werden (d.h. die entsprechenden Zellen sind nicht grün hinterlegt und das Einfügen eines „x“ ist nicht möglich). Während einige dieser PCs und ACs offensichtlich für die Expositionsabschätzung beim Verbraucher irrelevant sind (z.B. PC19 (Zwischenprodukte)) oder außerhalb des REACH-Anwendungsbereiches liegen (z.B. PC29 (Pharmazeutika)), trifft dies nicht auf alle betroffenen PCs/ACs zu. Beispielsweise haben Frostschutz- und Enteisungsmittel (PC4) eindeutig ein Potential der Verbraucherexposition, können mit dem Instrument aber nicht bewertet werden. Als Hilfskonstruktion können Ersatz-PC/AC oder -Unterkategorien ausgewählt und die Eingangsdaten angepasst werden. Die ECHA-Leitlinien (ECHA CSA 2010, Kapitel R.12) geben in Anhang R.12-7 für einige Fälle Hinweise, welche Ersatzkategorien in Frage kommen. Bei Anwendung von Ersatz-Kategorien sollten:

- die Expositionspfade und Eingangsparameter im Arbeitsblatt “Defaults” überprüft,
- die Eingangsparameter der tatsächlichen Verwendung entsprechend angepasst (z.B. mit sektor-spezifischen Daten) und
- die Änderungen dokumentiert sowie Ähnlichkeiten und Unterschiede der Verwendung (tatsächliche Verwendung vs. gewählter PC/AC) diskutiert werden.

Ähnlich ECETOC TRA für den Arbeitsplatz kann auch in dem Instrument für den Verbraucherbereich die Gesamtexposition über alle drei Expositionspfade berechnet werden. Im Teil Risikocharakterisierung (verschiedene Spalten in den Arbeitsblättern „Results by Sentinel Prod” und „Results by Prod Subcat”) wird die Gesamtexposition durch den worst-case Referenzwert (im Benutzerhandbuch definiert als „üblicherweise der niedrigste der pfadspezifischen Referenzwerte“) geteilt um so den Gesamt-RCR zu erhalten. Wie das folgende (erfundene) Beispiel zeigt, kann diese Vorgehensweise komplett irreführend sein, weil es damit möglich ist, dass der Gesamt-RCR deutlich über 1 ist, während alle pfadspezifischen RCRs deutlich unter 1 sind. Eine Ursache hierfür ist, dass der orale Referenzwert (der wahrscheinlich derjenige ist, der am häufigsten verfügbar ist) am niedrigsten von allen Referenzwerten sein kann (d.h. zum Vergleich mit der Gesamtexposition herangezogen wird), obwohl eine orale Exposition nicht erwartet wird. Letzteres ist in ECETOC TRA für den Verbraucherbereich nicht die Ausnahme, sondern die Regel, weil eine orale Exposition des Verbrauchers im Großen und Ganzen auf das „mouthing“ bei Kleinkindern beschränkt ist (orale Exposition von Erwachsenen wird nur in einer von 46 Unterkategorien erwartet).

Exposition (mg/kg x d)			
Dermal	Oral	Inhalation	Gesamt
10		15	25
Referenzwert (mg/kg x d)			
Dermal	Oral	Inhalation	Worst-case
50	10	20	10
RCR			
Dermal	Oral	Inhalation	Gesamt / Worst-case
0.2		**0.75**	**2.5**

Es wird daher nicht empfohlen, den Gesamt-RCR ohne genaue Prüfung zu verwenden. In einigen Fällen dürfte die Bewertung pfad-spezifischer RCRs durch Experten geeigneter sein.

Anhang F des „Technical Reports“ (ECETOC 2009) beschreibt mehrere Verfeinerungsoptionen, die schlussendlich die Genauigkeit der Schätzungen erhöhen. Wenn viele dieser Optionen angewendet werden (z.B. Berücksichtigung von Luftwechselraten und Anwendung von spezifischen statt Standard-Werten) wird das Instrument ein Model der „Stufe 1,5“ (ECETOC 2009), das irgendwo zwischen Stufe 1 und Modellen der höheren Stufe, wie ConsExpo, liegt. Viele dieser Verfeinerungen können nicht im Instrument umgesetzt werden, sondern müssen separat berechnet werden. Beispielsweise bietet das Instrument keine Möglichkeit, Luftwechselraten einzugeben (was auch sinnvoll ist, da es ein Instrument der Stufe 1 ist).

Abschließend ist eine Warnung angebracht. Mit nur einer Ausnahme wird die Häufigkeit der Verwendung auf ein Ereignis pro Tag festgesetzt (d.h. es wird kein Durchschnitt über 1 Woche oder 1 Jahr genommen). Die Expositionsabschätzungen des Instruments beziehen sich somit im Grunde auf die Exposition während dieses Ereignisses an einem Tag (z.B. während der Ausbringung einer Farbe oder während ein Kind mit einem Spielzeug spielt). Die abgeschätzte Exposition muss somit mit einem akuten Referenzwert verglichen werden, insbesondere in den Fällen, in denen eine tägliche Verwendung nicht anzunehmen ist. Beispielsweise ist es sehr unwahrscheinlich, dass ein Verbraucher über einen längeren Zeitraum täglich 15 kg Teppichkleber ausbringt (PC1-2; dies ist der im Instrument verwendete Standardwert). Alternativ kann bei intermittierender Exposition der Durchschnitt aus den für verschiedene Tage abgeschätzten Werten gebildet und mit chronischen Referenzwerten verglichen werden. Dies erfordert für das entsprechende Produkt eine Kenntnis der Verwendungshäufigkeit und eine Dokumentation der Informationen.

Wie bereits erwähnt wird die dermale Exposition mit einem neuen Algorithmus berechnet, der auf die Einbeziehung eines Migrationsfaktors verzichtet. Dieser Algorithmus berechnet die Exposition unter der Annahme einer Hautkontaktfläche sowie einer angenommenen Dicke der Produktschicht, die mit der Haut in Kontakt kommt. Zusätzlich wird angenommen,

dass das Produkt eine Standarddichte von 1 g/cm^3 Produkt aufweist. Auf der Grundlage dieser Annahmen kann dann die Produktmenge berechnet werden, die zur Exposition beiträgt. Anhand des Beispiels AC8-3 (Papiertaschentücher, Papierhandtücher, Feuchttücher und Toilettenpapier; Standard-Eingabewerte) kann gezeigt werden, dass dieser Wert etwas von der gesamten Produktmenge abweichen kann, die für die inhalative Exposition angenommen wird:

Dermal exposure		**Inhalation exposure**
Contact area	857.5 cm^2	
Thickness of layer	0.01 cm	
Density of product	1 g/cm^3	
Amount of product	**8.572 g**	**5.7 g**

Wenngleich diese Abweichung in der Produktmenge für ein vergleichsweise grobes Instrument der Stufe 1 nicht sehr groß ist, sollte sich der Anwender über diese, aus der Anwendung unterschiedlicher Algorithmen resultierenden Differenzen im Klaren sein. Folglich ist in diesem Zusammenhang eine Überprüfung der Massenbilanz sicher hilfreich, insbesondere

- wenn Standard-Eingabewerte durch den Anwender geändert werden (z.B. die Produktmenge bei inhalativer Exposition) und
- bei Abschätzungen zur gesamten Exposition (siehe Diskussion weiter unten), weil die Algorithmen üblicherweise eine vollständige (100%) Freisetzung des Stoffes annehmen und somit potentiell zu einer “Doppelzählung” in der Schätzung der gesamten Exposition führen.

Zusammenfassend ist ECETOC TRA für den Verbraucherbereich ein sehr wertvolles Instrument für das Screening der Verbraucherexposition und erlaubt die Ermittlung von Expositionen, die mit einem hohen Risiko verknüpft sind. Das Instrument beinhaltet zahlreiche Standardwerte und ist einfacher zu handhaben als die in Kapitel 2.2.1 eingeführten Gleichungen, insbesondere wenn mehrere Szenarien zu bewerten sind. In einigen Fällen führt es bei Verwendung der gleichen Eingangswerte zu identischen Ergebnissen wie die Gleichungen (z.B. bei inhalativer Exposition gegenüber Stoffen mit einem hohen Dampfdruck; an die Luft abgegebener Anteil =1). In anderen Fällen sind die Ergebnisse recht unterschiedlicher, beispielsweise für Stoffe mit niedrigem Dampfdruck (an die Luft abgegebener Anteil z.B. 0,01), da dieser Faktor in den einfachen Gleichungen nicht berücksichtigt wird.

2.2.3 Verwendung von Instrumenten zur Expositionsabschätzung – höhere Stufe

Anwender von Instrumenten zur Expositionsabschätzung sollten beachten, dass die meisten Instrumente von sehr konservativer Natur sind (d.h. in den meisten Fällen auf der sicheren, höheren Seite der Expositionsabschätzungen liegen) und dass sie nur begrenzt und/oder für einige Verwendungen validiert sind. Insbesondere die Anwendung von Modellen höherer Stufe erfordert in vielen Situationen ein tiefgehendes Verständnis der Expositionsabschätzung und Erfahrung in der Handhabung der Instrumente, um sehr ungenaue Schätzungen zu vermeiden.

Das in diesem Kapitel diskutierte Instrument der höheren Stufe kann prinzipiell für Stoffe an sich, Stoffe in Gemischen und für Stoffe in Erzeugnissen verwendet werden.

Die Software ConsExpo (Version 4.1, verfügbar unter: http://www.consexpo.nl, das dort verfügbare Handbuch (Delmaar et al. 2005) wurde noch nicht von Version 4.0 auf 4.1 aktualisiert) wird hier vertiefend diskutiert, da sie breite Anwendung findet und verschiedene produktspezifische Eingangsdaten anbietet (verfügbar über die Default-Datenbank), deren Herkunft in den „Fact sheets“ (s. obige Box) zurückverfolgt werden kann. Daher kann beurteilt werden, ob ein ConsExpo Default-Wert für das betrachtete ES konservativ genug oder überkonservativ ist (jedem Wert wurde auch eine Qualitätskategorie zugewiesen). Wie unten gezeigt wird, sind sowohl die Software als auch die Verbraucherexposition an sich komplex, so dass die Durchführung einer Bewertung ein gewisses Maß an Erfahrung und Sachkenntnis in der Expositionsabschätzung erfordert.

Nach Aufrufen der Software ist es hilfreich, die vier verschiedenen Teile von ConsExpo in der folgenden Reihenfolge durchzugehen:

- PRODUCT & COMPOUND: Eingabe von Basisdaten (z.B. Molekulargewicht, P_{OW} und Dampfdruck für den Stoff);
- EXPOSURE SCENARIO: Auswahl aus der Default-Datenbank (s.u.);
- EXPOSURE ROUTES: Eingabe fehlender Daten (d.h. solche, die nicht von der Default-Datenbank zur Verfügung gestellt werden);
- OUTPUT: Ergebnisse, Dokumentations- und Analysefunktionen.

Die Default-Datenbank enthält die folgenden Produkt-Datenbanken:

- PAINTING PRODUCTS (Anstrichmittel);
- COSMETICS (Kosmetika);
- PEST CONTROL PRODUCTS (Schädlingsbekämpfungsmittel);
- CLEANING AND WASHING (Wasch- und Reinigungsmittel);
- DISINFECTANTS (Desinfektionsmittel);
- DO-IT-YOURSELF PRODUCTS (Heimwerkerprodukte).

Für jede Produkt-Datenbank gibt es mehrere Produkt-Kategorien und für jede Produkt-Kategorie gibt es mehrere Default-Produkte, für die eines oder mehrere Szenarien definiert sind (d.h. viele Default-Eingangswerte sind bereits enthalten). Dieser verzweigte Ansatz stellt sich für ein Geschirrspüler-Pulver wie folgt dar (es sind hier die Originalbezeichnungen der Software angegeben):

- Cleaning and washing (<u>product database</u>)
  - Dishwashing products (<u>product category</u>)
    - Machine dishwashing powder (<u>default product</u>)
      - Loading (<u>scenario</u>)

Einer der hauptsächlichen Vorteile der ConsExpo-Software besteht darin, dass Default-Werte für viele Szenarien eingeschlossen sind (s.u.) und dass der zu berücksichtigende Pfad sowie das am besten geeignete Modell aufgerufen werden, wenn das Szenario ausgewählt wurde. Wenn beispielsweise das „loading“-Szenario in diesem Beispiel ausgewählt wird, zeigt der Eingabebildschirm die inhalative Exposition als Pfad an (gekennzeichnet durch Fragezeichen, d.h. eine Dateneingabe ist erforderlich) und gibt das Modell an (“Exposure to vapour: instantaneous release“) (Abbildung 2-3, links).

Wenn andererseits das „post-application“-Szenario für das gleiche Default-Produkt ausgewählt wird, weist der Eingabebildschirm darauf hin, dass die orale Exposition mit dem Modell „Oral exposure to product: direct intake” (Abbildung 2-3, rechts) zu berücksichtigen ist.

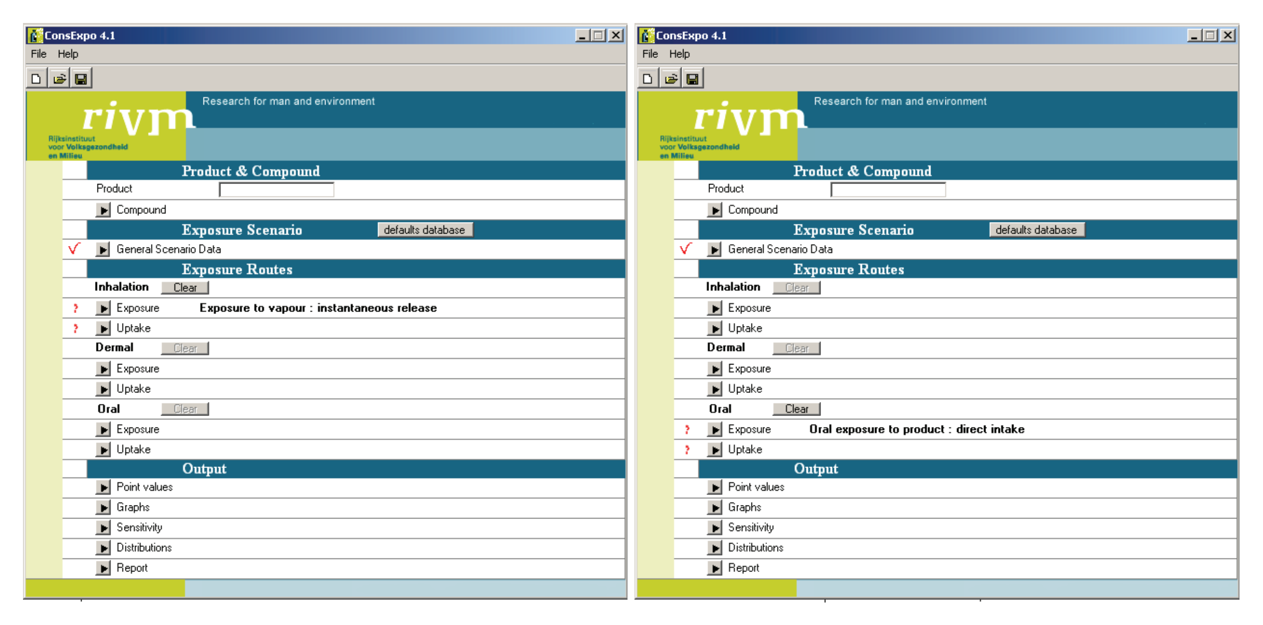


Abbildung 2-3 Druckbildschirme, die den Expositionspfad und das in ConsExpo angewendete Modell zeigen: Geschirrspüler-Pulver, „loading“ (links) und „post-application“ (rechts)

Info-Box 12

Ein näherer Blick auf die Default-Eingangswerte in Tabelle 2-1 weist eine sehr geringe Anwendungsmenge von nur 0,27 µg aus. Ein unerfahrener Benutzer würde diesen Wert vermutlich mit einem höheren Wert überschreiben. Bei dem Wert handelt es sich jedoch um die Staubmenge, die aus 200 g Pulver erzeugt wird (abgeleitet aus Werten für Waschpulver, Proud'homme et al. 2006). Dies zeigt, dass Angaben aus den „fact sheets" (in diesem Beispiel: Proud'homme et al. 2006) oftmals zur Verwendung von ConsExpo erforderlich sind. Allgemeiner verweist dieses Beispiel darauf, dass Erfahrungen in Expositionsabschätzung und ein Verständnis der beteiligten Parameter und Modelle zur Anwendung der Software notwendig ist.

Die folgende Tabelle 2-1 führt die Eingangsdaten für das Beispiel „Laden des Geschirrspüler-Pulvers" (stoffspezifische Daten wurden ausgelassen) auf, wobei durch den Benutzer auszuwählende Werte kursiv gesetzt sind. Von diesen

- bezieht sich der Anteil aufgenommenen Stoffes („uptake fraction") auf den Anteil, der für die systemische Aufnahme zur Verfügung steht; dieser wird auf 1 gesetzt, da die externe Exposition berechnet werden soll,
- ist der Gewichtsanteil des Stoffes im Produkt („weight fraction compound") aus den produktspezifischen Daten ersichtlich.

Dieses Beispiel zeigt auch, welche Art von Default-Daten der Benutzer von ConsExpo erwarten darf, beispielsweise Expositionshäufigkeit (252 Anwendungen des Geschirrspüler-Pulvers pro Jahr), Dauer (0,25 Minuten für die Beladung der Geschirrspülmaschine mit dem Pulver) und Raumvolumen (als Default auf 1 m^3 gesetzt, um die inhalative Exposition in unmittelbarer Nähe der Quelle zu modellieren).

Tabelle 2-1 Beispiel für die Eingangsdaten in ConsExpo: Beladung einer Geschirrspülmaschine mit Pulver, das 1% des betrachteten Stoffes enthält (vom Benutzer auszuwählende Werte sind kursiv gesetzt)

Eingangsparameter	**Wert**	**Einheit**
General Exposure Data		
Exposure frequency	252	1/year
Body weight	65	kilogram
Inhalation model	Exposure to vapour: instantaneous release	
Weight fraction compound	*0.01*	*fraction*
Exposure duration	0.25	minute
Room volume	1	m^3
Ventilation rate	2.5	1/hr
Applied amount	2.7E-7	gram
Uptake model	Fraction	

Eingangsparameter	Wert	Einheit
Uptake fraction	*1*	*fraction*
Inhalation rate	24.1	litre/min

Anmerkung:
Das Modell berechnet auch die Körperdosis und benötigt daher Daten (z.B. Atemvolumen, "inhalation rate"), die zur Abschätzung der Stoffkonzentration in der Luft nicht notwendig sind.

Die Eingangsparameter wurden unübersetzt aus ConsExpo übernommen.

Das obige Beispiel stellt ein differenzierteres Modell der Stufe 0 dar (sofortige Freisetzung wie in Stufe 0 angenommen, nun aber mit Lüftung).

Es ist eine weitere Stärke von ConsExpo, dass die Eingangswerte (einschließlich der in der Datenbank als Defaults gesetzten) geändert werden können. In diesem Zusammenhang kann auch die Sensitivitätsfunktion („sensitivity analysis") im OUTPUT-Teil von ConsExpo hilfreich sein. Beispielsweise ermöglicht es diese dem Benutzer, die Stoffkonzentration in der Luft in Abhängigkeit vom Raumvolumen zu modellieren.

Das obige Beispiel bezieht sich auf ein Gemisch, aber ConsExpo kann auch zur Modellierung der Exposition gegenüber einem Stoff aus einem Erzeugnis verwendet werden. Beispielsweise kann im Szenario „post-application" für das Default-Produkt Waschmittel („detergent powder") die dermale Exposition mit dem Modell „Direct dermal contact with product: migration" abgeschätzt werden. Wenngleich einige Default-Werte in diesem Modell gesetzt sind, erfordert der wichtige Parameter des auswaschbaren Anteils („leachable fraction") eine Konsultation des entsprechenden „fact sheets" (Proud'homme et al. 2006).

Prinzipiell kann ConsExpo auch zur Modellierung der Exposition ohne Verwendung der Default-Datenbank verwendet werden (z.B. dermale Exposition gegenüber einem Stoff, der in der Textilveredlung eingesetzt wird, mit obigem Migrationsmodell). Dies erfordert allerdings ein gutes Verständnis der Modelle, des Einflusses der verschiedenen Parameter und der Benutzer muss geeignete Werte für alle Eingangsparameter bestimmen.

Info-Box 13

ConsExpo erlaubt dem Benutzer für viele Eingangsparameter die Verwendung von Verteilungen statt Punktwerten (z.B. wenn der Mittelwert und die Standardabweichung eines Parameters bekannt sind). Die Software kann dann Wahrscheinlichkeitsrechnungen (Monte Carlo) durchführen.

Ein Spezialfall ist die Teilchengrößenverteilung eines Produkts, die einen bedeutenden Einfluss auf die inhalative Exposition gegenüber einem Spray hat und in dem entsprechenden Modell eingegeben werden kann. Dies stellt allerdings keine Verteilung in obigem Sinne dar und erlaubt keine Monte Carlo-Berechnungen.

Die Industrie hat zahlreiche Default-Werte entwickelt, die zusätzlich zu den ConsExpo-Default-Werten verwendet werden können. Beispielsweise stellt AISE (International Association for Soaps, Detergents and Maintenance Products; http://www.aise.eu) Default-Werte zu „Gewohnheiten und Praktiken“ von Verbrauchern zur Verfügung (z.B. zur Menge verwendeter Haushaltsprodukte sowie zur Dauer und Häufigkeit der Anwendung).

Andere Instrumente

Die EUSES-Anwendung (European Union System for the Evaluation of Substances, version 2.1, verfügbar unter: http://ecb.jrc.it/euses/) ist ein weiteres Software-Paket, das die Expositionsabschätzung für nahezu alle Bereiche, einschließlich den Verbraucherbereich, erlaubt. Falls komplexere Modelle zu Expositionsabschätzung des Verbrauchers benötigt werden, verweist EUSES auf ConsExpo.

ECHA CSA 2008 nennt zahlreiche, von der U.S.-Umweltbehörde (Environmental Protection Agency) zur Verfügung gestellte Software-Instrumente (z.B. E-FAST (Exposure and Fate Assessment Screening Tool, das CEM (Consumer Exposure Model) beinhaltet), MCCEM (Multi-Chamber Concentration and Exposure Model) und WPEM (Wall Paint Exposure Assessment Model), verfügbar unter http://www.epa.gov/opptintr/exposure/index.htm; s. auch Anhang R.15-3 „Computer tools for estimation of consumer exposure” in ECHA CSA 2008), die für die Expositionsabschätzung auf höherer Stufe hilfreich sein können. Diese Instrumente erfordern das gleiche oder sogar ein höheres Maß an Erfahrung wie ConsExpo.

Ferner hat die British Aerosol Manufacturers’ Association (BAMA; http://www.bama.co.uk) ein Instrument (BAMA Indoor Air Model) zur Abschätzung der Aerosolexposition durch Sprays unter einer großen Anzahl von Anwendungsbedingungen entwickelt. Das Benutzerhandbuch enthält sowohl generische Beispiele als auch Ratschläge zur Modellanwendung und zur Verwendung der Schätzungen in Stoffsicherheitsbeurteilungen.

2.2.4 Verfeinerung der Expositionsabschätzung Verbraucher

Wenn eine sichere Verwendung mit den im vorigen Kapitel diskutierten Instrumenten höherer Stufe nicht gezeigt werden kann, wird eine Verfeinerung der Expositionsabschätzung notwendig. Diese kann verschiedene Formen annehmen, beispielsweise:

- Berücksichtigung von (produktintegrierten) Risikomanagement-Maßnahmen (soweit nicht bereits bei der Erstellung des ES berücksichtigt), z.B. wenn ein Produkt als Granulat oder in Pellet-Form vermarktet wird, so dass die inhalative Staub-Exposition niedriger angenommen werden kann als beim Umgang mit Pulvern,
- Ersetzen der Default-Eingangswerte in ConsExpo durch produktspezifischere oder ES-spezifischere Daten (wenn dies begründet werden kann): hierzu ist das entsprechende ConsExpo „fact sheet“ zu Rate zu ziehen und die Eingangsparameter zu bewerten,

- Verwendung spezialisierter Modellierungsinstrumente, beispielsweise zur Abschätzung der Migration aus einem Erzeugnis (z.B. für die Migration aus Kunststoffen und polymeren Materialien, die mit Lebensmitteln in Kontakt kommen: http://www.inra.fr/Internet/Produits/securite-emballage),
- Verwendung gemessener Expositionsdaten (z.B. Prüfung der Daten des EIS-ChemRisk-Projektes: http://web.jrc.ec.europa.eu/eis-chemrisks/),
- Generierung von Messdaten, insbesondere für kritische Eingangsparameter, wie beispielsweise
  - die Partikelgrößenverteilung für die inhalative Exposition gegenüber Sprays: eine ausführliche Liste mit verfügbaren Methoden findet sich in Kapitel R.17.1.14 („granulometry“) in ECHA CSA 2008,
  - die Freisetzung eines Stoffes aus einem Erzeugnis für dermale Migrationsmodelle: BfR (2007) diskutiert kurz die Methoden zur Bestimmung der Migration von Chemikalien aus Textilien (dieser Beitrag enthält auch Default-Werte für Textilfarbstoffe und -hilfsstoffe),
  - die Freisetzung eines Stoffes aus einem Erzeugnis (auswaschbarer Anteil, „leachable fraction“) beim in den Mund nehmen („mouthing“): van Engelen et al. (2006, Kapitel 4) diskutieren ausführlich die zur Verfügung stehenden Methoden.
  - Es gibt mehrere Normen zur Bestimmung der Migration aus Erzeugnissen (teilweise in den oben genannten Übersichtsarbeiten diskutiert), z.B.
    - “DIN EN 71-10: Sicherheit von Spielzeug – Teil 10: Organisch-chemische Verbindungen - Probenvorbereitung und Extraktion”,
    - “DIN EN ISO 105-E04 (Norm-Entwurf): ”Textilien – Farbechtheitsprüfungen – Teil E04: Farbechtheit gegen Schweiß” und
    - “DIN EN 1186-3: Werkstoffe und Gegenstände in Kontakt mit Lebensmitteln – Kunststoffe – Teil 3: Prüfverfahren für die Gesamtmigration in wässrige Prüflebensmittel durch völliges Eintauchen”; z.B. verfügbar unter http://www.beuth.de.

Der zur Verfeinerung der Expositionsabschätzung schlussendlich verfolgte Ansatz hängt von der Natur des betrachteten ES ab und erfordert Expertenwissen in Expositionsabschätzung (und anderen Fachgebieten) sowohl hinsichtlich der Auswahl der sinnvollsten Strategie als auch hinsichtlich der Interpretation der Ergebnisse.

2.2.5 Kombinierte Aufnahme

Als letzter Schritt der Expositionsabschätzung sollte die kombinierte Aufnahme (in der Regel für die akute und die langfristige Aufnahme getrennt) bewertet werden. Die beinhaltet zwei Fälle:

- Wenn Verbraucher gegenüber einem bestimmten Produkt über verschiedene Pfade (z.B. inhalativ und dermal) exponiert sind, muss die kombinierte Aufnahme bestimmt werden (Addition der Dosen).
- Wenn Verbraucher gegenüber verschiedenen Produkten exponiert sind, die den gleichen Stoff enthalten, und wenn eine gleichzeitige Verwendung dieser Produkte wahrscheinlich ist, kann die Aufnahme des Stoffes aus diesen verschiedenen Produkten aufaddiert werden. (In der Praxis kann dies nur in solchen Fällen erreicht werden, in denen dem Registranten die Situation bewusst ist, beispielsweise wenn bekannte nachgeschaltete Anwender mehrere Produkte herstellen, die im Prinzip nebeneinander verwendet werden können, und diese Information nach oben (zum Registranten) übermitteln.)

ECHA CSA 2008 (Teil E, Kapitel 3.5; „Step 5: combined exposures") gibt weitere Ratschläge zu diesem Schritt.

2.2.6 Spezialfall: Indirekte Exposition des Menschen über die Umwelt

Die Exposition des Menschen über die Umwelt resultiert aus dem Verzehr von Lebensmitteln und Trinkwasser, der Inhalation und dem Verschlucken von Boden (nur in bestimmten Situationen relevant). Sie wird auf Basis der vorhergesagten Umweltkonzentrationen („predicted environmental concentrations", PECs) des Stoffes in (Oberflächen-) Wasser, Grundwasser, Luft und Boden abgeschätzt Die Methoden zur Abschätzung von PECs werden in dem Kapitel zur Expositionsabschätzung im Umweltbereich (Kapitel 3) beschrieben.

2.3 Risikobeschreibung

Nach REACH (Anhang I) soll die Risikobeschreibung davon ausgehen, dass die im Expositionsszenario beschriebenen Risikomanagement-Maßnahmen umgesetzt sind. Hierbei unterscheidet der REACH-Text nicht zwischen Verbrauchern und der beruflichen Situation. Dieser Ansatz wurde kritisiert (de Bruin et al. 2007), da Anweisungen und Empfehlungen zur Verwendung persönlicher Schutzmaßnahmen möglicherweise nur begrenzt befolgt werden, was zu Risiken für relevante Teile der Bevölkerung führt. Da unbestreitbar ist, dass schwere Gesundheitsrisiken für den Verbraucher zu vermeiden sind, sollte die adäquate Beherrschung der Risiken in solchen Fällen nicht von Risikomanagement-Maßnahmen abhängen, deren Nicht-Befolgung zu schweren gesundheitlichen Effekten, wie beispielsweise Ätzwirkung oder Atemwegssensibilisierung, führen kann. Methodische Vorschläge in ECHA CSA 2008 (Teil E, Kapitel 3.4) können für eine solche Differenzierung nach Effektschwere als Anleitung dienen: für die qualitative Risikobewertung werden Stoffe entsprechend ihrer Einstufung einer „hohen", „mittleren" oder „niedrigen" Gefährdung zugeordnet.

Wie in Kapitel 3.1.1 im Teil I des Praxisführers erläutert, werden Angaben zur Exposition im Abschnitt zur Risikobeschreibung des Stoffsicherheitsberichts mit den Gefährdungsdaten des Stoffes verglichen. In diesem Schritt werden die Expositionsabschätzungen mit den Dosiswerten, die keinen (oder nur geringen) Anlass zur Besorgnis bieten (d.h. DNELs, „derived no effect levels", oder DMELs, „derived minimum effect levels", für Stoffe ohne Schwellenwert), verglichen. Dieser Prozess, der in hohem Maße Expertenwissen und -erfahrung erfordert, wird hier nur allgemein beschrieben. Eine detailliertere Beschreibung des Vorgehens findet der Leser in ECHA CSA 2008 (Teil E).

Die Risiken für den Menschen werden als angemessen beherrscht angesehen, wenn

RCR („risk characterisation ratio") = Exposition / DNEL < 1,

d.h. der DNEL liegt oberhalb der Exposition.

Die in Kapitel 2.2.1 erläuterten Modelle der Stufe 0 führen zu verschiedenen Werten für die Expositionsabschätzung. Die folgende Tabelle stellt diesen Arten von Schätzwerten die entsprechenden Arten von DNELs gegenüber (s. auch ECHA CSA 2008, Kapitel R.8 für Arten von DNELs).

Tabelle 2-2 Arten von Werten für die Expositionsabschätzung (Stufe 0) und entsprechende Arten von DNELs für die Allgemeinbevölkerung

Werte der Expositionsabschätzung	DNEL
C_{inh}: Stoffkonzentration im Raum [mg/m^3] (akut oder langfristig)	DNEL akut Inhalation DNEL langfristig Inhalation
L_{der}: dermale Beladung: Stoffmenge auf Hautfläche pro Ereignis [mg/cm^2]	DNEL akut dermal lokal (mutmaßlich selten verfügbar)
D_{der}: dermale Dosis: Stoffmenge, die potentiell aufgenommen werden kann [mg/kg Körpergewicht und Tag]	DNEL langfristig dermal
D_{oral}: Aufnahme des Stoffes [mg/kg Körpergewicht und Tag] (akut oder langfristig)	DNEL akut oral DNEL langfristig oral

Im Falle von Stoffen ohne Schwellenwert, für die ein DMEL abgeleitet wurde, beschreibt eine Exposition unterhalb des DMEL ein niedriges, tolerierbares Risiko. DNELs/DMELs sollten für alle kritischen Endpunkte und Pfade abgeleitet werden.

Wenn die Exposition gegenüber einem Stoff in einer bestimmten Situation über mehrere Expositionspfade erfolgt oder wenn verschiedene Produkte diesen Stoff enthalten, sollte die kombinierte Exposition berücksichtigt werden. Dies kann zum einen dadurch geschehen, dass alle Expositionen (als Körperdosen) aufaddiert werden und die Gesamtexposition mit dem geeigneten DNEL verglichen wird. Zum anderen können die für einzelne Pfade oder Situationen berechneten RCRs addiert werden.

In einigen Fällen liegen möglicherweise Angaben zu den toxischen Effekten für einige Endpunkte vor, es existieren aber keine Daten, die die Ableitung eines DNEL oder DMEL erlau-

ben. ECHA CSA 2008 (Teil E, Kapitel 3.4.1) führt hierzu die akute Toxizität, Reizung/Ätzwirkung (Haut und Auge), Sensibilisierung, Mutagenität und Kanzerogenität an. In diesem Fall muss eine qualitative Risikobeschreibung mit dem Ziel erfolgen, eine angemessene Beherrschung der Risiken darzulegen. Eine Anleitung, wie eine solche Bewertung erfolgen kann, ist in ECHA CSA 2008 (Teil E) zu finden.

2.4 Kommunikation der Ergebnisse in den Expositionsszenarien und Scaling

Die Risikobeschreibung führt zu einer Beschreibung der Verwendungsbedingungen (Anwendungsbedingungen und Risikomanagement-Maßnahmen), unter denen eine sichere Verwendung des Stoffes gezeigt werden kann. Diese Verwendungsbedingungen sind als wesentlicher Teil des Expositionsszenarios in der Lieferkette zu kommunizieren.

Die Angaben des ES müssen von dem nachgeschalteten Anwender, z.B. einem Unternehmen, das den Stoff zur Herstellung eines Verbraucherproduktes verwendet, für die Prüfung verwendet werden, ob seine Verwendung des Stoffes innerhalb der vom Registranten berücksichtigten Verwendungsbedingungen liegt („compliance check“). Der Registrant kann dem nachgeschalteten Anwender als Teil des ES „Scaling“-Methoden an die Hand geben. „Scaling“-Methoden stellen einfache Gleichungen dar, mittels derer der nachgeschaltete Anwender zeigen kann, dass er innerhalb der Bedingungen des ES handelt, selbst wenn (einige) seine(r) Anwendungsbedingungen von den durch den Registranten beschriebenen abweichen. Scaling und hierfür entwickelte Hilfsmittel werden im Teil I des Praxisführers im Kapitel 7.7 beschrieben.

Es muss beachtet werden, dass die Anwendung von „Scaling“-Methoden nur dann möglich ist, wenn der Registrant die entsprechenden Gleichungen sowie eine transparente Beschreibung seiner Expositionsabschätzung bereitstellt.

Beispiel:

Die Exposition des Verbrauchers gegenüber einem flüchtigen Stoff durch die Verwendung eines Gemisches wurde berechnet. Der Registrant nahm eine vollständige Verdampfung des in dem Gemisch enthaltenen Stoffes und eine homogene Verteilung in der Raumluft an, um die inhalative Expositionskonzentration zu berechnen. Sowohl die Größe des Raumes als auch die Stoffmenge in dem Gemisch sind linear mit der Expositionskonzentration korreliert. Dies wurde vom Registranten transparent gemacht, der zudem im ES folgende „Scaling“-Regeln lieferte:

1. Die Expositionskonzentration ist linear und invers mit der Raumgröße korreliert
2. Die Expositionskonzentration ist linear mit der Stoffkonzentration in dem Gemisch korreliert

3. Die Expositionskonzentration ist linear mit der Menge des verwendeten Gemisches korreliert

Ein Hersteller (nachgeschalteter Anwender) eines Klebstoffgemisches für Verbraucher verwendet den Stoff in höherer Konzentration. Die Menge des verwendeten Gemisches ist allerdings wesentlich geringer. Durch Anwendung der "Scaling"-Regeln 2 und 3 ist es ihm möglich zu zeigen, dass seine Verwendung mit dem ES konform ist, selbst wenn einige Verwendungsbedingungen nicht eingehalten werden:

Vom Registranten im Expositionsszenario genannte Werte:

- Konzentration von Stoff Y von bis zu 20 Gew.-%, zu verwendende Menge bis zu 10 g (einmalige Anwendung)

Verwendungsbedingungen des Klebstoffproduktes für Verbraucher:

- Konzentration von Stoff Y im Produkt ist 40 Gew.-%, zu verwendende Menge pro einmalige Anwendung ist 1 g.

Um eine Einhaltung des Expositionsszenarios zu zeigen, kann der Hersteller des Klebstoffprodukts

1. entweder Algorithmen verwenden, wenn sie vom Registranten bereit gestellt wurden, und seine eigenen Werte einsetzen, um die Exposition unter seinen eigenen Anwendungsbedingungen neu zu berechnen, oder
2. (basierend auf dem vom Registranten ausgewiesenen linearen Zusammenhang) argumentieren, dass die 2-fach höhere Konzentration von Y im Produkt durch die 10-fach niedrigere Menge pro Anwendung aufgehoben wird.

Lineare Korrelationen sind die am einfachsten anzuwendenden „Scaling“-Regeln. Beispiele für Parameter, die linear mit der Exposition in Beziehung stehen können sein (dies kann aber vom ES und dem verwendeten Expositionsmodell abhängen):

- Raumvolumen (bis zu einer gewissen Grenze, so lange eine homogene Verteilung angenommen werden kann);
- Verwendete Menge;
- Konzentration in dem Gemisch;
- Expositionsdauer;
- Anwendungsfläche für Beschichtungsmittel.

Das „Scaling“ nicht linear korrelierter Parameter erfordert üblicherweise die Anwendung komplizierterer Expositionsmodelle oder anderer Instrumente, die eindeutig beschrieben und vom Registranten bereitgestellt werden sollten, wenn er solche „Scaling“-Regeln vorschlägt.

2.5 Literatur

Api, A. M., Basketter, D. A., Cadby, P. A., Cano, M. F., Ellis, G., Gerberick, G. F., Griem, P., McNamee, P. M., Ryan, C. A., Safford, R.; 2008
Dermal sensitization quantitative risk assessment (QRA) for fragrance ingredients
Regulatory Toxicology and Pharmacology, 52, 2008, 3-23

BfR, Bundesinstitut für Risikobewertung; 2007
Einführung in die Problematik der Bekleidungstextilien
BfR Information Nr. 018/2007, Berlin

Bremmer, H. J., van Veen, M. P.; 2002
Children's Toys Fact Sheet. RIVM Report 612810012/2002
RIVM, Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven, Netherlands, 2002

Bremmer, H. J., Prud'homme de Lodder, L. C. H., van Engelen, J. G. M.; 2006
General Fact Sheet. Limiting conditions and reliability, ventilation, room size, body surface area. Updated version for ConsExpo 4. RIVM report 320104002/2006
RIVM, Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven, Netherlands, 2006

de Bruin, Y. B., Hakkinen, P., Lahaniatis, M., Papameletiou, D., del Pozo, C., Reina, V., van Engelen, J., Heinemeyer, G., Viso, A. C., Rodriguez, C., Jantunen, M.; 2007
Risk management measures for chemicals in consumer products: documentation, assessment, and communication across the supply chain
Journal of Exposure Science and Environmental Epidemiology,17, Suppl. 1, 2007, S44-S55

Delmaar, J. E., Park, M. V. D. Z., van Engelen, J. G. M.; 2005
ConsExpo 4.0. Consumer Exposure and Uptake Models Program Manual. Report 320104004/2005
RIVM, Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven, Netherlands, 2005

Prud'homme de Lodder, L. C. H., Bremmer, H. J., van Engelen, J. G. M.; 2006
Cleaning Products Fact Sheet. RIVM report 320104003/2006
RIVM, Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven, Netherlands, 2006

ter Berg, W., Bremmer, H. J., van Engelen, J. G. M.; 2007
Do-It-Yourself Products Fact Sheet. RIVM report 320104007/2007
RIVM, Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven, Netherlands, 2007

van Engelen, J. G M., Park, M. V. D. Z., Janssen, P. J. C. M., Oomen, A. G., Brandon, E. F. A., Bouma, K., Sips, A. J. A. M., van Raaij, M. T. M.; 2006
Chemicals in Toys. A general methodology for assessment of chemical safety of toys with a focus on elements. RIVM/SIR Advisory Report 0010278A01
RIVM, Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven, Netherlands, 2006

3 Expositionsabschätzung Umwelt

3.1 Ziel der Umweltexpositionsabschätzung und Umweltrisikobeschreibung

Ziel der Umweltexpositionsabschätzung ist es, die zu erwartenden Konzentrationen (PEC-Werte)[8] eines Stoffes in den Umweltkompartimenten Wasser, Sediment, Boden, Luft, Prädatoren etc. zu ermitteln. Diese Umweltkonzentrationen werden dann in der nachfolgenden Risikobeschreibung mit den ökotoxikologischen Effektkonzentrationen (PNEC Werte)[9] des jeweiligen Stoffes verglichen.

Am Anfang einer Expositionsbestimmung steht die Abschätzung der Emissionen eines Stoffes in die verschiedenen Umweltkompartimente. Zu Emissionen kann es entlang des gesamten Lebenswegs eines Stoffes kommen (wie z.B. während der Produktion, der Nutzungsphase und/oder der Entsorgung). Das Ausmaß der Freisetzung kann entweder direkt gemessen oder aber muss abgeschätzt bzw. berechnet werden.

Nach der Emissionsabschätzung folgt die Bestimmung der Expositionshöhe, indem für alle relevanten Umweltbereiche die zu erwartenden Konzentrationen eines Stoffes (PEC-Wert) abgeleitet werden. Die Ableitung der PEC-Werte erfolgt entweder durch Messungen (z.B. im Rahmen von Umweltüberwachungsprogrammen) oder durch computergestützte Modellberechnungen. Letztere berücksichtigen auch Verhalten, Transport und Verbleib der freigesetzten Chemikalien in der Umwelt

Umweltexpositionsabschätzungen werden für die folgenden Schutzziele durchgeführt:

- Oberflächengewässer (einschließlich Sediment);
- Meerwasser (einschließlich Sediment);[10]
- Terrestrische(= Land-)Ökosysteme;
- Tiere an der Spitze der Nahrungskette / Prädatoren (Sekundärvergiftungen);
- Mikroorganismen in der Kläranlage;
- Atmosphäre (Luft)[11];
- Indirekte Exposition des Menschen über die Umwelt.

In der anschließenden Risikobewertung werden die PEC-Werte dann mit den in ökotoxikologischen Tests bestimmten Wirkkonzentrationen (PNEC-Werten) verglichen. Bei einem

8 PEC: **P**redicted **E**nvironmental **C**oncentration

9 PNEC: **P**redicted **N**o **E**ffect **C**oncentration

10 Risikobewertungen für die Meeresgewässer sind nur dann erforderlich wenn es zu einer direkten Einleitung von industriellen Abwässern ins Meer kommen kann.

11 Relevant in erster Linie für Stoffe, die ein Potential haben, die Ozonschicht anzugreifen oder den Treibhauseffekt zu beschleunigen oder Sauren Regen zu verursachen.

PNEC-Wert handelt es sich um die Konzentration eines Stoffes, bei der noch keine negative Wirkung auf die Umwelt zu erwarten ist. PNEC-Werte werden von den Ergebnissen ökotoxikologischer Tests (wie z.B. LC_{50} oder NOEC) abgeleitet unter Berücksichtigung geeigneter Sicherheitsfaktoren. Die zu erwartende Umweltkonzentration (PEC) sollte die für die Umwelt als unschädlich angesehene Konzentration (PNEC) nicht überschreiten, d.h. das Verhältnis sollte < 1 sein. Liegt der PEC/PNEC-Wert ≥ 1, sind zusätzliche Maßnahmen zur Verringerung der Umweltexposition notwendig.

Für bestimmte Stoffe (wie z.B. anorganische Stoffe oder Metalle) sind Risikobewertungen in Form einer PEC/PNEC Abschätzung nicht unbedingt geeignet, da die zugrundeliegenden Vorgaben in erster Linie für organische Stoffe entwickelt wurden[12]. Für Metalle liegt z.B. ein spezieller Leitlinie vor für die Umweltrisikoabschätzung von Metallen und anorganischen Metallverbindungen (“Metals Environmental Risk Assessment Guidance – MERAG”)[13].

Andere Stoffe können mittels chemischer Prozesse (wie z.B. Oxidation, Neutralisation, Fällung) fast vollständig aus dem Abwasser entfernt werden. Umweltexpositionsabschätzungen für diese Stoffe sollten daher eher auf Basis von gemessenen Freisetzungsraten und/oder Expositionsdaten durchgeführt werden.

3.2 Durchführung einer Umweltexpositionsabschätzung

Eine Umweltexpositionsabschätzung beinhaltet die folgenden Schritte:

- Emissionsabschätzung (basierend auf Messwerten oder berechneten Konzentrationen) unter Berücksichtigung von Risikomanagement-Maßnahmen (wie z.B. biologische und/oder chemische Abwasserbehandlung),
- Berücksichtigung von Verteilungs-, Umwandlungs- und Abbauprozessen in der Umwelt,
- Abschätzung der Exposition der Umwelt durch Ableitung der PEC-Werte,
- Risikobewertung durch Vergleich der PEC- und PNEC-Werte.

Der Ablauf einer Umweltexpositionsabschätzung ist in Abbildung 3-1 grafisch dargestellt.

---

[12] Für einige anorganische Stoffe / Metalle (wie z.B. ZnO, CdO, etc) gibt es bereits EU Risikobewertungen auf Basis des PEC/PNEC Ansatz, die belegen, dass dieser Ansatz auch für anorganische Stoffe und Metalle angewendet werden kann. Die bereits veröffentlichten Berichte (EU Risk Assessment Reports) können daher als Anleitung dienen, wie Risikobewertungen für andere anorganische Stoffe und Metalle durchgeführt werden können.

[13] http://www.icmm.com/page/1185/metals-environmental-risk-assessment-guidance-merag

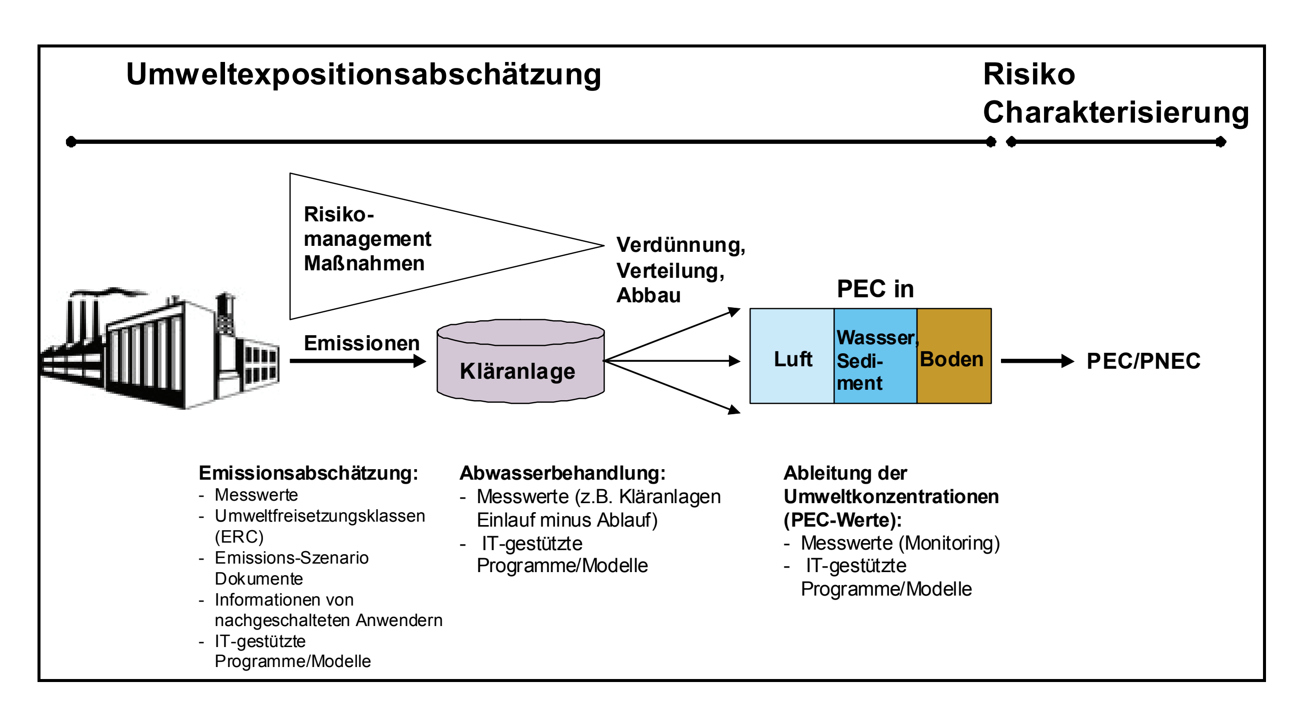


Abbildung 3-1 Umweltexpositionsabschätzung und Risikobeschreibung

3.2.1 Emissionsabschätzung

Wie bereits oben gesagt, ist die Emissionsabschätzung der erste Schritt der umweltbezogenen Expositionsabschätzung. Emissionen in die Umwelt können bei allen Prozessen oder Aktivitäten entlang des Lebensweges eines Stoffes (wie z.B. während Herstellung, Verarbeitung, industrieller/professioneller/privater Nutzung sowie der Abfallentsorgung) auftreten.

Bei der Emissionsabschätzung wird zwischen Freisetzungen auf lokaler und regionaler Ebene unterschieden. Lokale Emissionen spielen eine Rolle in der unmittelbaren Umgebung von Punktquellen und werden als tägliche Durchschnittskonzentrationen angegeben. Regionale Emissionen dagegen werden nicht für einzelne Emissionsquellen berechnet, sondern für regionale Räume über einen längeren Zeitraum. Sie bilden somit eine Art Hintergrundkonzentration eines Stoffes und werden als Jahresdurchschnittskonzentrationen für Wasser, Luft und Boden angegeben.

Das Verhältnis von lokaler zu regionaler Umwelt ist in Abbildung 3-2 illustriert.

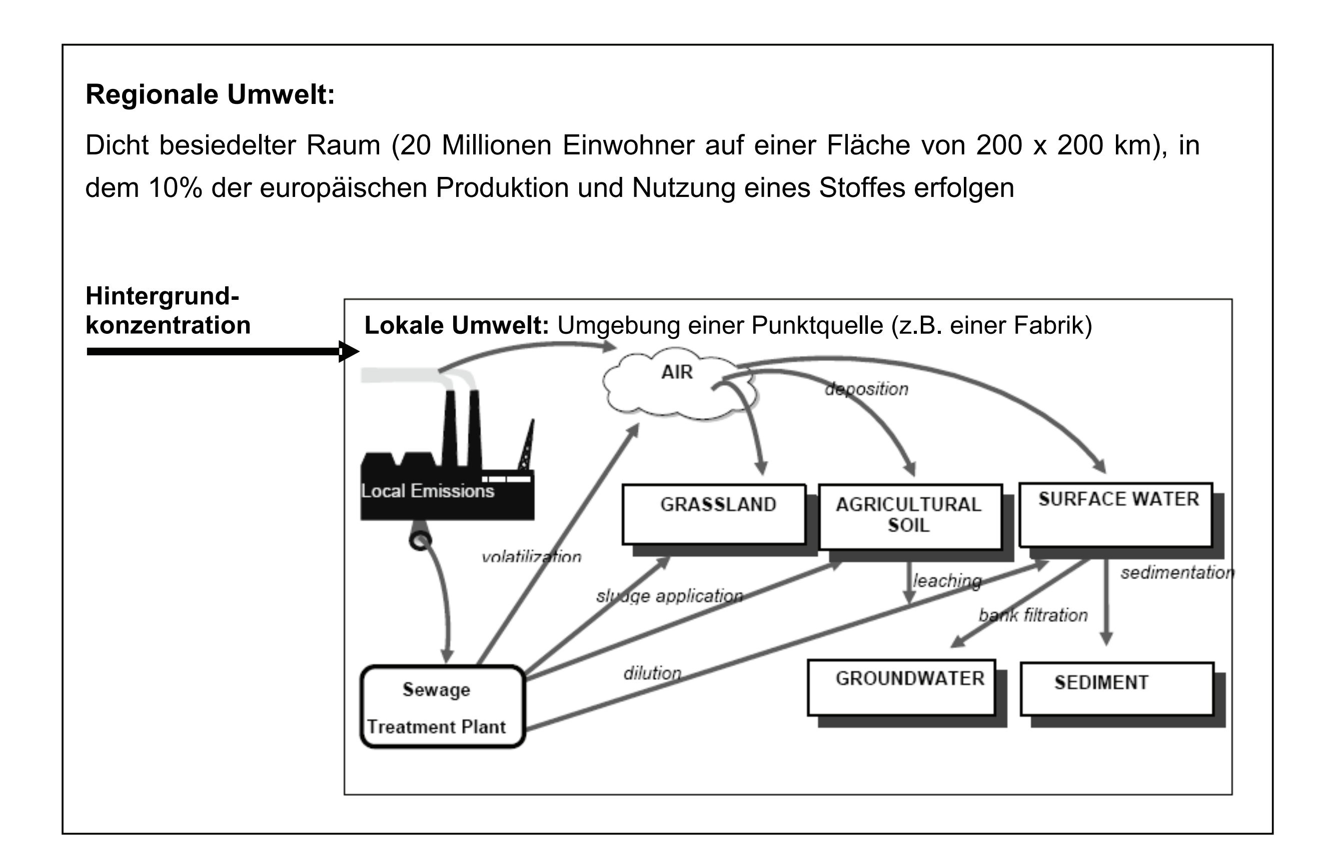


Abbildung 3-2 Verhältnis zwischen lokalen und regionalen Emissionen eines Stoffes

3.2.1.1 Bestimmende Faktoren der Freisetzung

Die beim Einsatz eines Stoffes zu erwartende Freisetzung und daraus resultierende Umweltexposition wird von mehreren Einflussfaktoren bestimmt. Hierzu zählen:

- Einsatzmenge des Stoffes
- Vorherrschende Emissionswege (d.h. Freisetzung in Wasser, Boden, Luft oder Feststoffabfall)
- Freisetzungs- / Emissionsfaktoren (z.B. der Anteil, der von der eingesetzten Menge ins Abwasser gelangt; „Verlustanteil“) vor dem Einsatz schadstoffreduzierender Technologien
- Effizienz der eingesetzten schadstoffreduzierenden Technologien
- Räumliche Verteilung der Emissionsquellen (lokale und regionale Emissionen)
- Dauer der Emissionen (z.B. Arbeitstage pro Jahr).

3.2.1.2 Methoden zur Emissionsabschätzung in die Umwelt

Messwerte

Messwerte zur Freisetzung eines Stoffes könnten leicht zu ermitteln sein für die ersten drei Abschnitte des Lebenszyklus eines Stoffes: (i) Produktion, (ii) Formulierung, (iii) industrielle Nutzung. Denn diese Informationen sind häufig in den behördlichen Genehmigungen niedergelegt.

Vor der Verwendung von Messwerten sollte jedoch geprüft werden, ob die Daten auch wirklich die im Expositionsszenario beschriebene(n) Anwendung(en) abdecken. Messwerte sind nicht per se zu bevorzugen, sondern müssen, ebenso wie berechnete Werte, bestimmte Qualitätskriterien erfüllen. Allgemeine Kriterien wurden bereits im Kapitel 1.2.1 besprochen. Weitere Kriterien sind im nachfolgenden Kapitel "Verwendung von Messdaten" aufgelistet.

Abschätzung

Für die restlichen Abschnitte im Lebenszyklus eines Stoffes liegen der Erfahrung nach eher selten Messwerte vor, so dass die Emissionen in die Umwelt mit Hilfe geeigneter Methoden abgeschätzt werden müssen. Dafür steht eine Anzahl verschiedener Methoden zur Verfügung. Wie bereits im Kapitel 1.2.1 angesprochen, steigt der Grad der Differenzierung und somit die Anforderungen an die Eingabeparameter, von der initialen konservativen Bewertung (Stufe 1; (im Englischen als „Tier 1" bezeichnet) zu weitergehenden Bewertungen (höhere Stufen (im Englischen als „higher tier" bezeichnet) an. Dieser schrittweise Ansatz soll sicherstellen, dass aufwendige und zeitintensive Abschätzungen und Berechnungen nicht von vornherein auch für solche Anwendungen und Situationen durchgeführt werden müssen, bei denen von einer vernachlässigbaren Exposition der Umwelt ausgegangen werden kann.

Die folgenden Ansätze sind für eine Erstabschätzung (Stufe 1) geeignet:

- Berechnung der Freisetzungsrate (entweder manuell oder IT gestützt wie z.B. mit dem Modell EUSES) unter Anwendung der in den REACH Leitlinien vorgegebenen Gleichungen (Leitlinie Kapitel R.16, Gleichungen R.16-1 and R.16-2).

  Die für diese Gleichungen notwendigen Eingabeparameter sind weiter oben im Abschnitt „Bestimmende Faktoren der Freisetzung" aufgelistet.

  Alternativ können für eine Stufe-1 Abschätzung vordefinierte Emissionsfaktoren genutzt werden, die in den neu definierten Umwelt-Freisetzungskategorien (Environmental Release Categories; ERCs) vorgegeben sind. Eine Zusammenstellung der ERCs findet sich im ECHA Leitlinie Kapitel R.16 (Anhang R.16-1, Tabellen R.16-20 bis R.16-23). Diese ERCs spezifizieren Standardwerte für Emissionen in die Umweltbereiche Wasser, Boden und Luft für die einzelnen Lebenswegabschnitte eines Stoffes vor dem Einsatz von schadstoffreduzierenden Technologien. Eine genauere Beschreibung der ERCs wird im nachfolgenden Abschnitt gegeben. Die Zuordnung eines Stoffes zu den einzelnen ERC Klassen erfordert keine Stoffspezifischen Informationen. Das Konzept

der ERCs im Use Descriptor System wird beschrieben im Teil R.12 der ECHA Leitlinie zu den Informationsanforderungen und zur Stoffsicherheitsbeurteilung (Kapitel R12.3.4, Anhänge R.12.4.1 und R12.4.2).

- Branchenspezifische OECD und EU Emissionsszenario Dokumente (Emission Scenario Documents; ESDs) ebenso wie generische US EPA Szenarien (US EPA OPPT Generic Scenarios; http://www.epa.gov/oppt/exposure) können alternativ zu den oben besprochenen ERC Klassen genutzt werden. Allerdings gibt es diese Szenarien noch nicht für alle industrielle Branchen / Anwendungen.
- Generische Expositionsszenarien (generic exposure scenarios; GES) sowie weitere branchenspezifische Informationen, die von verschiedenen Industriesektoren entwickelt worden sind (siehe auch Kapitel 9.7 und 10 im Teil II des REACH Praxisführers).
- Anwendungsspezifische Informationen zu Emissionen; diese können sowohl auf Messungen basieren als auch von nachgeschalteten Anwendern, Experten oder genaueren Prozessbeschreibungen stammen.

Umweltfreisetzungskategorien (Environmental Release Categories; ERC)

Die sogenannten Umweltfreisetzungskategorien (ERCs) wurden definiert, um die Ableitung von Freisetzungs-/Emissionsfaktoren bei den Stufe 1 Abschätzungen zu erleichtern (REACH Leitlinie Kapitel R.16, Tabellen R.16-22 and R.16-23).

Dabei wurden für jede ERC Standardfaktoren für die Emission / Freisetzung in die Umweltbereiche Luft, Wasser und Boden definiert unter der Annahme, dass keine Risikomanagement-Maßnahmen eingesetzt werden. Diese Freisetzungs-/Emissionsfaktoren werden dann in die Gleichungen R.16-1 und R.16-2 (siehe ECHA Leitlinie Kapitel R.16) eingesetzt, um die Freisetzung eines Stoffes in die Umwelt zu berechnen.

Die Auswahl der geeigneten ERC erfordert Kenntnisse über die wesentlichen Verwendungsbedingungen eines Stoffes:

- Lebenszyklusabschnitt des Stoffes: Produktion, Verarbeitung oder Nutzungsphase
- Anwendung in offenen oder geschlossenen Systemen
- Typ der Anwendung im Lebenszyklusabschnitt : Einschluss in/auf eine Matrix, Verarbeitungshilfsmittel, Zwischenprodukt, Monomer etc.
- Verteilung der Emissionsquellen: industrielle Nutzung oder weitflächige Anwendung
- Innenanwendung (mit Anschluss an eine Abwasserbehandlung) oder Freilandanwendung (ohne Anschluss an eine Abwasserbehandlung)

Für die Auswahl der geeigneten ERC und der Ableitung der vordefinierten Freisetzungs-/ Emissionsfaktoren sind dagegen keine Informationen über stoffspezifische Eigenschaften erforderlich.

Zusätzlich zu den Freisetzungs-/Emissionsfaktoren, enthalten die ERCs auch festgelegte Werte für folgende Größen (siehe auch Tabelle R.16-23 im ECHA Leitlinie Kapitel R.16):

- Prozentsatz des Stoffes, der als Eingabe für die Emissionsberechnung benutzt werden sollte,
- Freisetzungszeitraum, angegeben in Tagen pro Jahr,
- Standard-Verdünnungsfaktoren, die für die nachfolgende PEC Berechnung herangezogen werden sollten.

Emissionsabschätzungen auf Basis der Umweltfreisetzungsklassen stellen einen konservativen Ansatz dar und finden bei Stufe 1 Abschätzungen Anwendung.

Wenn die initiale Risikoabschätzung mit konservativen Emissionsfaktoren ergibt, dass die Anwendung des Stoffes nicht sicher ist und somit ein Risiko für die Umwelt besteht, sollten präzisere Emissionsraten ermittelt werden, die z.B. zum Einsatz kommende emissionsreduzierende Risikomanagement-Maßnahmen berücksichtigen. Solche Emissionsraten können z.T. den branchen-spezifischen Emissionsszenario-Dokumenten (Emission Scenario Documents; ESDs) oder auch den generischen Expositionsszenarien entnommen werden. Daneben besteht die Möglichkeit andere Informationsquellen wie z.B. Daten, die von nachgeschalteten Anwendern zur Verfügung gestellt werden, zu nutzen, um die Stufe 1 Expositionsabschätzungen zu verfeinern.

Einzelne Branchen können spezifischere Umweltfreisetzungs-Kategorien festlegen, die die Emissionssituation für ihre spezifischen Prozesse genauer beschreiben. Diese Kategorien werden „spezifische Umweltfreisetzungskategorien“ genannt (in englischer Sprache: specific environmental release categories, spERCs (siehe hierzu auch Kap. R.16.3.5 der ECHA Leitlinie zu den Informationsanforderungen und der Stoffsicherheitsbeurteilung).

Die aktualisierte Fassung des Instruments ECETOC TRA ermöglicht die Eingabe der spERCs durch den Anwender. Die neueste Überarbeitung (Stand: 26. April 2010) ist im Internet jeweils verfügbar unter der Adresse at http://www.ecetoc.org/tra.

3.2.1.3 Abwasserbehandlung

Ein entscheidender Punkt bei der Abschätzung der Emissionen und der Exposition der Umwelt (vor allem der aquatischen Umwelt) ist die Frage, ob das Abwasser eine Kläranlage passiert – also einer Abwasserbehandlung unterzogen wird – bevor es in den Vorfluter gelangt.

Viele der größeren Industrieanlagen sind üblicherweise an eine kommunale Kläranlage angeschlossen oder verfügen über Reinigungsanlagen auf dem eigenen Gelände. Diese

Kläranlagensind nicht immer mit einer biologischen Klärstufe ausgerüstet, aber verfügen oft über eine physikalisch-chemische Behandlung des Abwassers, wodurch organische Stoffe durch Zugabe geeigneter Fällung- und Flockungsmittel (wie z.B. Eisensalze) entfernt werden. An die Elemination schließt sich oft ein Sedimentationsschritt an. Dies führt zu einer Verringerung des Gehaltes an organischem Material um 25–50% (gemessen als chemischer Sauerstoffbedarf, CSB).

Dieser Situation wird in den Umweltexpositionsabschätzungen wie folgt Rechnung getragen:

Auf lokaler Ebene, d.h. für die Berechnung der lokalen PEC-Werte für die aquatische Umwelt, wird eine Abwasserbehandlung und eine entsprechende Eliminierung des Stoffes im Kläranlagenausfluss dann berücksichtigt, wenn im Expositionsszenario angegeben ist, dass solche Risikominderungsmaßnahmen zum Einsatz kommen. Wenn nicht klar ist, ob das Abwasser eine Kläranlage passiert oder nicht, sollten die PEC-Werte für beide Szenarien (d.h. mit und ohne Abwasserbehandlung) berechnet werden.

Die PEC-Werte, die unter der Annahme berechnet wurden, dass keine Abwasserbehandlung erfolgt, sollten aber nur dann für die Risikoabschätzung herangezogen werden, wenn für den Stoff unter Betracht eine spezifische Anwendung identifiziert wird, bei der ein direktes Einleiten des Abwassers in den Vorfluter weit verbreitet ist.

Auf regionaler Ebene wird angenommen, dass 80% des Abwassers in einer (biologischen) Kläranlage behandelt werden, während die restlichen 20% direkt in Vorfluter eingeleitet werden.

Der Grad der Entfernung eines Stoffes aus dem Abwasser in einer Kläranlage ist abhängig von den physikalisch-chemischen Stoffeigenschaften wie der Bioabbaubarkeit, Adsorption an den Klärschlamm, Flüchtigkeit, etc.) und den technischen Gegebenheiten der Kläranlage:

Hinsichtlich der Nutzung von gemessenen, simulierten und modellierten Daten zum Grad der Entfernung eines Stoffes aus dem Abwasser sollten folgende Aspekte berücksichtigt werden:

- Messwerte aus einer vollstufigen Kläranlage.

  Der Grad der Eliminierung Stoffes aus dem Abwasser wird durch Messungen im Kläranlageneinlauf und -auslauf und der resultierenden Differenz der Konzentrationen ermittelt. Auch für Messwerte aus einer Kläranlage gilt, dass die Daten in Bezug auf ihre Eignung und Repräsentativität hin geprüft werden sollten.

- Daten aus Abbautests.

  Die Bioabbaubarkeit eines Stoffes wird in der Regel in Standard-Abbautests im Labor getestet. Diese Testsysteme sollen solche Bedingungen widerspiegeln, die während der aeroben Abwasserbehandlung im Belebtschlammbecken einer Kläranlage herrschen oder andere Umweltbedingungen, z.B. einen Fluss.

  Die gängigen Standard-Abbautests folgen den OECD Richtlinien 301 für „Inhärente Bioabbaubarkeit“ sowie 302 für „Leichte Bioabbaubarkeit“.

- Modellierung des Verhaltens von Stoffen in Kläranlagen.

  Wenn keine Messwerte oder Testdaten aus Abbau- und Simulationsversuchen vorliegen, kann der Eliminierungsgrad eines Stoffes im Abwasser mit Hilfe eines Kläranlagensimulations-Modells abgeschätzt werden. Für eine Modellierung sind die folgenden stoffspezifischen Eingabeparameter notwendig:
- Oktanol/Wasser Verteilungskoeffizient (log Kow);
- Henry Konstante;
- Ergebnisse der Bioabbautests.

  Ein Kläranlagensimulations-Modell (SimpleTreat) ist in der Software EUSES implementiert, einem Programm zur Expositionsabschätzung und Risikobewertung von Chemikalien, das weiter unten näher beschrieben wird.

3.2.2 Verteilungs- und Umwandlungsprozesse in der Umwelt

Verteilungs- und Umwandlungsprozesse eines Stoffes in der Umwelt werden im zweiten Schritt der umweltbezogenen Expositionsabschätzung berücksichtigt.[14]

Nach der Freisetzung eines Stoffes in die Umwelt, finden verschiedenartigste Verteilungs-, Umwandlungs- und Abbauprozesse statt, die zur Folge haben, dass sich der Stoff sowie mögliche Umwandlungs- und Abbauprodukte in den Umweltkompartimenten Luft, Boden, Wasser, Sediment und Lebewesen in unterschiedlichen Konzentrationen verteilen.

Für die Umweltexpositionsabschätzung spielen vor allem die folgenden Prozesse eine wichtige Rolle:[15]

- Verflüchtigung von Stoffen mit hohem Dampfdruck
- Adsorption an Boden, Sediment und Schwebstoffen im Wasser
- Biokonzentration[16] und Biomagnifikation[17] in Mensch und Tier
- Umwandlungs- und Abbauprozesse in der Umwelt. Sowohl Bioabbau als auch abiotische Abbauprozesse wie z.B. Hydrolyse und Photolyse können – je nach Stoff – von Bedeutung sein. Falls stabile und/oder toxische Abbauprodukte (Metabolite) entstehen,

14 In der Praxis ist die Berücksichtigung von Verteilungs- und Umwandlungsprozessen in erster Linie dann von Bedeutung, wenn die initialen Expositionsabschätzungen (Stufe 1) zeigen, dass die PEC-Werte die PNEC-Werte überschreiten und somit die betrachtete Anwendung eines Stoffes nicht als sicher gilt. Verteilungs- und Umwandlungsprozesse eines Stoffes in der Umwelt reduzieren i.d.R. die zu erwartenden Umweltkonzentrationen und senken daher das PEC/PNEC Verhältnis.

15 Diese Prozesse werden in dem Computerprogramm EUSES bei der Berechnung von PEC-Werten automatisch berücksichtigt.

16 Biokonzentration: Anreicherung von Schadstoffen über die Körperoberflächen von Organismen (Lunge, Kieme, Haut)

17 Biomagnifikation: Anreicherung von Schadstoffen aus der Umwelt in Lebewesen über die Nahrung

sollten diese in die Expositionsabschätzung und Risikobewertung eingebunden werden, zumindest in dem Maße, in dem Daten zu diesen Abbauprodukten vorhanden sind.

Um das Verteilungs- und Abbauverhalten eines Stoffes in der Umwelt abschätzen zu können, sind die folgenden Stoffspezifischen Daten notwendig: Molekulargewicht, Wasserlöslichkeit, Dampfdruck, Oktanol-Wasser Verteilungskoeffizient und Ergebnisse der Bioabbautests. Bei anorganischen Stoffen sollten zudem Informationen über den abiotischen Abbau sowie die Verteilungskoeffizienten zwischen Festphase/Wasser und Wasser/Biota vorliegen.

3.2.3 Expositionsabschätzung mit Ableitung von PEC-Werten

Exposition der Umwelt ist das Ergebnis einer Freisetzung von Stoffen, die teilweise durch Behandlungsmaßnahmen abgebaut oder entfernt werden, und die sich dann in der Umwelt verteilen bzw. dort abgebaut werden. Unter Berücksichtigung möglicher in der Umwelt auftretender Verteilungs- und Transformationsprozesse werden bei der Expositionsabschätzung die zu erwartenden Konzentrationen eines Stoffes in den verschiedenen Umweltkompartimenten (PEC-Werte in Wasser/Sediment, Boden und Luft) abgeleitet. Außerdem wird das Risiko für Tiere an der Spitze der Nahrungskette (Prädatoren) infolge von Sekundärvergiftungen und die indirekte Exposition des Menschen über die Umwelt abgeschätzt.

3.2.3.1 Verwendung von Messwerten

Für einige Stoffe liegen Werte von gemessenen Konzentrationen für die Umweltbereiche Luft, Süß- und Salzwasser, Sediment, Biota und/oder Boden vor. Diese Werte stammen z.B. aus Überwachungsprogrammen (Umweltmonitoring). Bevor diese Daten für die Risikoabschätzung herangezogen werden, sollten sie anhand der nachfolgend aufgelisteten Kriterien auf ihre Eignung und Repräsentativität geprüft werden. Sie werden dann zusammen mit berechneten Umweltkonzentrationen für die Expositionsabschätzung verwendet.

- Die Qualität und Verlässlichkeit der gemessenen Daten wird kontrolliert, indem die Probenahme und die analytischen Methoden überprüft werden. Ein Qualitätscheck der angewandten Probenahme- und Messtechniken ist notwendig, um zu entscheiden, inwieweit die Messwerte ohne Einschränkung valide sind und somit für die Expositionsabschätzung genommen werden können oder ob die Messwerte nur bedingt valide sind und daher nur herangezogen werden sollten, um die berechneten PEC-Werte zu stützen. Tabelle R.16-4 im Kapitel R.16 der ECHA Leitlinie listet Qualitätskriterien für die Nutzung von Messwerten auf.
- Die Messwerte müssen repräsentativ für das betroffene Umweltkompartiment sein. Damit ist gemeint, dass die Häufigkeit der Probenahme sowie das Probenahmemuster ausreichend und geeignet sein müssen, die Umweltkonzentrationen an einem ausgewählten Standort adäquat widerzuspiegeln. So sind sporadische Messungen weniger

repräsentativ als regelmäßige Messungen am gleichen Standort über einen längeren Zeitraum. Durch einen Unfall oder durch eine Betriebsstörung verursachte Konzentrationen in der Umwelt sollten bei Expositionsabschätzungen nicht berücksichtigt werden.

- Messwerte sollten lokalen oder regionalen Szenarien zugeordnet werden indem die Expositionsquelle in die Betrachtung mit einbezogen wird. So sollten Proben bzw. Messwerte von Standorten, die direkt durch Emissionen belastet werden, zur Ableitung von lokalen PEC-Werten verwendet werden. Dagegen stellen Werte, die in größerer Entfernung von Emissionsquellen gemessen wurden, regionale Hintergrundkonzentrationen dar (PEC regional).

Sowohl die Mittelwerte als auch die Bandbreite der gemessenen Konzentrationen sollte angegeben werden. Wenn nur Maximalkonzentrationen bekannt sind, sollten diese explizit als ungünstigster Fall (worst case) dargestellt werden, vorausgesetzt sie sind nicht unfallverursacht oder durch eine Betriebsstörung bedingt (siehe oben). Die ausschließliche Verwendung von Mittelwerten kann dagegen zu einer Unterschätzung eines existierenden Risikos führen, da zeitliche und/oder räumliche Durchschnittskonzentrationen keine Perioden und/oder Orte mit hoher Belastung widerspiegeln.

Gemessene Umweltkonzentrationen sollten mit den entsprechenden berechneten PEC-Werten verglichen werden. Bei auch natürlich vorkommenden Stoffen sind hierbei die bestehenden Hintergrundkonzentrationen mit zu berücksichtigen. Für die abschließende Risikobewertung sollte dann aus den gemessenen und berechneten Umweltkonzentrationen ein repräsentativer PEC ausgewählt werden. Weitere Details zu der Auswahl eines repräsentativen PEC-Wertes sind im unten folgenden Abschnitt „Berechnete PEC-Werte im Vergleich zu gemessenen PEC-Werten“ beschrieben.

3.2.3.2 Berechnung der zu erwartenden Umweltkonzentrationen (PEC-Werte)

Die PEC-Werte für die **aquatische und terrestrische Umwelt** sowie für die **Atmosphäre werden** sowohl für den **lokalen als auch für den regionalen Rahmen** berechnet. Wie unter Kapitel 3.2.1 näher erläutert, spiegeln die lokalen Werte Umweltkonzentrationen in der Nähe von Punktquellen wider, wogegen der regionale PEC-Wert die durch alle Emissionsquellen einer Region verursachte Hintergrundkonzentration eines Stoffes ist.

Der lokale PEC-Wert wird berechnet als Summe der durch die Punktquelle verursachten Emissionen plus der Hintergrundkonzentration.

Für die Berechnung der Hintergrundkonzentration bzw. regionalen Konzentration (PECregional) werden alle Emissionen einer Region mit einbezogen und alle Verteilungs- sowie Umwandlungs- und Abbauprozesse eines Stoffes in der Umwelt berücksichtigt. Das bedeutet, dass ein Hersteller oder Importeur für die Berechnung der regionalen Konzentrationen alle

Freisetzungen seines Stoffes entlang der Lieferkette in die Berechnung mit einbeziehen muss.

Für die Berechnung der regionalen PEC-Werte wäre es jedoch (auf freiwilliger Basis) sinnvoll, alle Emissionen eines Stoffes in einer Region, d.h. auch diejenigen, die von anderen Herstellern oder Importeuren verursacht werden, also das gesamte geschätzte Marktvolumen eines Stoffes, in die Berechnung mit aufzunehmen.

Zusätzlich zu der Ableitung der Umweltkonzentrationen ($PEC_{Wasser,\ Boden,\ Luft}$) ist es in bestimmten Fällen erforderlich, die zu erwartenden Konzentrationen im Futter von Prädatoren, d.h. in Würmern und Fischen zu berechnen ($PEC_{oral,\ Prädator}$), um das **Risiko einer Sekundärvergiftung** abschätzen zu können.

Unter Sekundärvergiftungen versteht man toxische Effekte in aquatischen oder terrestrischen Organismen höherer trophischer Ebenen der Nahrungskette (wie z.B. Meeressäuger oder Raubvögel). Diese toxischen Effekte werden durch Aufnahme von Organismen aus niedrigeren trophischen Ebenen (wie z.B. Würmern oder Fischen), in denen sich der betrachtete Stoff akkumuliert hat, verursacht. Dieser Pfad der Exposition ist dann relevant, wenn es bei dem betrachteten Stoff Anzeichen für eine Bioakkumulation gibt. Diese Anzeichen sind gegeben, wenn der Stoff bei einem jährlichen Produktions-/Importvolumen von 1 – 100 Tonnen[18]

- einen log Kow ≥ 3 und ein Molekulargewicht > 700 g/mol hat; oder
- sehr stark adsorbiert; oder
- zu der Klasse von Stoffen gehört, die bekannt dafür sind, sich in lebenden Organismen anzureichern; oder
- aufgrund seiner strukturellen Merkmale Anzeichen für eine mögliche Bioakkumulation gibt; oder
- keinerlei Eigenschaften aufweist, die einer Akkumulation entgegenwirken (wie z.B. hydrolytischer Abbau in weniger als 12 Stunden).

Für die Abschätzung, inwieweit Sekundärvergiftungen ein relevanter Expositionspfad sind, ist außerdem von Bedeutung, ob der Stoff in höheren Organismen toxische Effekte auslösen kann. Dabei wird die Einstufung eines Stoffes basierend of Säugetiertoxizitätsdaten zu Grunde gelegt: Ein Stoff besitzt das Potential toxische Effekte auszulösen, wenn er als sehr toxisch (T+) oder toxisch (T) oder gesundheitsschädlich (Xn) eingestuft ist mit wenigstens einem der folgenden R-Sätze: R48 „Gefahr ernster Gesundheitsschäden bei längerer Exposition“; R60 „Kann die Fortpflanzungsfähigkeit beeinträchtigen“; R61 „Kann das Kind im Mutterleib schädigen“; R62 „Kann möglicherweise die Fortpflanzungsfähigkeit beeinträchti-

[18] REACH Annex IX gibt vor, dass Informationen zur Bioakkumulation in aquatischen Organismen erforderlich sind für Stoffe mit einem Produktions-/Importvolumen von 100 Tonnen/Jahr und mehr.

gen“; R63 „Kann das Kind im Mutterleib möglicherweise schädigen“; R64 „Kann Säuglinge über die Muttermilch schädigen“. Es wird angenommen, dass die verfügbaren Säugetiertoxizitätsdaten ausreichende Hinweise auf mögliche Risiken durch den Stoff auf höhere Organismen in der Umwelt geben können.

Wenn ein Stoff also entsprechend eingestuft ist oder es andere Anzeichen für toxische Effekte wie z.B. endokrine Wirkungen gibt, dann sollte eine Abschätzung möglicher Sekundärvergiftungen erfolgen.

Das mögliche Risiko durch Sekundärvergiftungen von fisch- oder wurmfressenden Prädatoren wird dargestellt als das Verhältnis zwischen der berechneten Konzentration im Futter ($PEC_{oral,\ Prädator}$) und dem PNEC-Wert für orale Aufnahme ($PNEC_{oral}$). Die Konzentration des Stoffes im Futter (Fisch oder Wurm) wird berechnet aus der Umweltkonzentration im Wasser oder im Boden (PEC_{Wasser} oder PEC_{Boden}), dem Biokonzentrationsfaktor (bioconcentration factor; BCF[19]) für Fisch oder Regenwurm sowie dem entsprechenden Biomagnifikationsfaktor (biomagnification factor; BMF[20]).

Die Abschätzung der **indirekten Exposition des Menschen über die Umwelt** ist in bestimmten Fällen ebenfalls gefordert im Zuge der Umweltexpositionsabschätzung. Eine indirekte Exposition kann z.B. durch Aufnahme von belasteten Nahrungsmitteln wie Fisch, Feldfrüchten, Fleisch oder Milch, durch kontaminiertes Trinkwasser oder durch Einatmen belasteter Luft erfolgen.

Eine solche Abschätzung sollte immer dann durchgeführt werden wenn:

- die Tonnage > 1.000 Tonnen pro Jahr beträgt; oder
- die Tonnage > 100 Tonnen pro Jahr beträgt und der Stoff eingestuft ist als
  - toxisch und mit dem R48 gekennzeichnet ist; oder
  - krebserzeugend oder erbgutverändernd (jeglicher Kategorie); oder
  - reproduktionstoxisch (fortpflanzungsgefährdend) (Kategorie 1 oder 2).

---

[19] Der BCF beschreibt die Bioakkumulation in aquatischen Spezies und ist definiert als das Verhältnis der Stoffkonzentration in einem Organismus und dem umgebenden Wasser. Der BCF kann entweder in Tests experimentell bestimmt werden oder wird auf Basis des logKow (Oktanol/Wasser-Verteilungskoeffizienten) unter Zuhilfenahme sogenannter QSAR Methoden bestimmt (siehe auch ECHA Leitlinie Kapitel R.7c, Abschnitt R.7.10.3.2).

[20] Der BMF ist definiert als das Verhältnis der Stoffkonzentration in einem Prädator und in seiner Beute ($BMF = C_{Prädator}/C_{Beute}$).

3.2.3.3 Berechnete PEC-Werte im Vergleich zu gemessenen PEC-Werten

Wenn PEC-Werte einerseits von gemessenen Umweltkonzentrationen abgeleitet und andererseits berechnet wurden, sollten diese beiden Werte miteinander verglichen werden. Falls sich gemessene und berechnete Umweltkonzentrationen deutlich unterscheiden, sollte eine Analyse und eine kritische Diskussion der möglichen Ursachen für diese Abweichungen als Teil der Umweltrisikoabschätzung erfolgen. Die folgenden Fälle lassen sich unterscheiden:

- Berechneter PEC ≈ PEC basierend auf gemessenen Konzentrationen
  Das Ergebnis zeigt, dass die wichtigsten Quellen einer Exposition berücksichtigt worden sind. Für die nachfolgende Risikobewertung sollte der Wert mit dem höchsten Konfidenzbereich genommen werden;
- Berechneter PEC > PEC basierend auf gemessenen Konzentrationen
  Das Ergebnis könnte zeigen, dass entscheidende Eliminierungsprozesse (wie z.B. Risikomanagement-Maßnahmen) bei der Berechnung nicht berücksichtigt worden sind, oder dass das benutzte Modell nicht geeignet war, um die realen Umweltbedingungen für den betrachteten Stoff zu simulieren. Es kann aber auch der Fall sein, dass die Messwerte nicht verlässlich sind oder nur die Hintergrundkonzentration (PECregional) und nicht die Umweltkonzentration in der Nähe einer Punktquelle erfasst haben. Wenn der PEC basierend auf gemessenen Konzentrationen von einer ausreichenden Zahl von verlässlichen und repräsentativen Proben abgeleitet wurde, dann sollte dieser PEC genommen werden und nicht die Modellvorhersage (d.h. der berechneten PEC).
- Berechneter PEC < PEC basierend auf gemessenen Konzentrationen
  Dieser Fall kann dann zu Stande kommen, wenn entscheidende Emissionsquellen nicht bei der Berechnung berücksichtigt wurden, oder wenn das benutzte Modell nicht geeignet war. Weitere mögliche Erklärung können sein, dass der Abbau des Stoffes in der Umwelt in der Berechnung überschätzt worden ist, dass die höheren Messwerte auf ein unfallbedingtes Austreten des Stoffes zurückzuführen sind, oder aber dass sich das Anwendungsmuster oder emissionsreduzierende Maßnahmen verändert haben und diese Änderungen noch nicht in den Messwerten widergespiegelt werden.

Wenn Messwerte der kritischen Prüfung hinsichtlich ihrer Eignung und Repräsentativität Stand halten (siehe Kapitel 3.2.3.1), kann ihnen ein hohes Maß an Vertrauen entgegengebracht werden, und dann sollten diese Messwerte anstelle von berechneten Werten für die weitere Risikobewertung benutzt werden.

3.2.4 Risikobeschreibung

3.2.4.1 Quantitative Risikobeschreibung durch PEC/PNEC-Vergleich

Unter einer quantitativen Risikobeschreibung versteht man den Vergleich des PEC-Wertes mit dem PNEC[21] durch Bildung des sogenannten Risikoquotienten (risk characterisation ratio; RCR). Dieser wird für jedes einzelne Umweltschutzziel berechnet:

Umweltschutzziele im Inland / Binnenland:

- Aquatische Ökosysteme einschließlich Sedimente;
- Terrestrische Ökosysteme;
- Atmosphäre / Luft;
- Mikroorganismen in einer Kläranlage;
- Fisch- und wurmfressende Prädatoren (Sekundärvergiftungen)[22].

Bei industriellen Anlagen, die ihr Abwasser direkt ins Meer einleiten, ist zusätzlich zur Umweltrisikoabschätzung für das Inland auch eine Abschätzung für die marine Umwelt gefordert. Letzteres entfällt bei Industrieanlagen, die ihr Abwasser ausschließlich (über Kläranlagen) in Süßwasser wie z.B. Flüsse einleiten.

Marine Umweltschutzziele umfassen:

- Aquatische Ökosysteme einschließlich Sedimente;
- Prädatoren und Spitzenprädatoren (Sekundärvergiftungen).

In Tabelle 3-1 und Tabelle 3-2 sind die verschiedenen Risikoquotienten (PEC / PNEC Quotienten) zusammengefasst, die für Risikoabschätzungen für das Inland und für die marine Umwelt gefordert sind.

---

[21] PNEC: Predicted no-effect concentration; Methoden zur Ableitung von PNECs aus den Ergebnissen ökotoxikologischer Tests sind im ECHA Leitlinie Kapitel R.10 näher beschrieben: „Characterisation of dose [concentration]-response for environment“.

[22] Die Abschätzung der Exposition von Prädatoren ist nur für solche Stoffe gefordert, die Anzeichen für eine Bioakkumulation zeigen und die ein Potential haben in höheren Organismen toxische Effekte auszulösen, wenn sie in diesen akkumulieren (siehe auch Abschnitt „Berechnung der zu erwartenden Umweltkonzentrationen - PEC-Werte“)

Tabelle 3-1 Übersicht der Risikoquotienten (PEC / PNEC Quotienten), die für **Inland** Risikoabschätzungen gefordert sind

Lokal		**Regional**	
Wasser:	$PEC_{lokal\ Wasser}$ / $PNEC_{Wasser}$	Wasser:	$PEC_{regional\ Wasser}$ / $PNEC_{Wasser}$
Sediment:	$PEC_{lokal\ Sediment}$ / $PNEC_{sediment}$	Sediment:	$PEC_{regional\ Sediment}$ / $PNEC_{Sediment}$
Boden:	$PEC_{lokal\ Boden}$ / $PNEC_{Boden}$	Boden:	$PEC_{regional\ Boden}$ / $PNEC_{Boden}$
Mikroorganismen:	$PEC_{Kläranlage}$ / $PNEC_{Mikroorganismen}$	-	
Fischfressende Prädatoren:	(0.5 x $PEC_{lokal,oral\ Fisch}$ + 0.5 x $PEC_{regional,oral\ Fisch}$) / $PNEC_{oral}$		
Wurmfressende Prädatoren:	(0.5 x $PEC_{local,oral\ Wurm}$ + 0.5 x $PEC_{regional,oral\ Wurm}$) / $PNEC_{oral}$		

Tabelle 3-2 Übersicht der Risikoquotienten (PEC / PNEC Quotienten), die für **marine** Risikoabschätzungen gefordert sind

Lokal		**Regional**	
Wasser:	$PEC_{lokal\ Salzwasser}$ / $PNEC_{Salzwasser}$	Wasser:	$PEC_{regional\ Salzwasser}$ / $PNEC_{Salzwasser}$
Sediment:	$PEC_{lokal\ Sediment}$ / $PNEC_{marines\ Sediment}$	Sediment:	$PEC_{regional\ Sediment}$ / $PNEC_{marines\ Sediment}$
Prädatoren:	[($PEC_{lokal\ Salzwasser,ann}$ + $PEC_{regional\ Salzwasser}$) x 0.5 x BCF_{Fisch} x BMF1] / $PNEC_{oral\ Prädator}$		
Spitzenprädatoren:	[(0.1 x $PEC_{lokal\ Salzwasser,ann}$ + 0.9 x $PEC_{regional\ Salzwasser}$) x BCF_{Fisch} x BMF1 x BMF2] / $PNEC_{oral\ Spitzenprädator}$		

Für den Umweltbereich „Luft” wird in der Regel nur eine qualitative Abschätzung der abiotischen Effekte durchgeführt.[23]

Wie im Abschnitt 3.2.3.2 erläutert, ist in bestimmten Fällen auch eine Abschätzung der “Indirekten Exposition des Menschen über die Umwelt” erforderlich. Das Ergebnis dieser Abschätzung wird als regionale oder lokale Dosis eines Stoffes durch Umweltexposition dargestellt. Für die Risikobewertung werden diese Dosis-Werte dann mit den entsprechenden DNEL Werten für äußere Expositionen verglichen.

Falls bei der oben beschriebenen quantitativen Risikobeschreibung nicht gezeigt werden konnte, das die zu erwartenden Umweltkonzentrationen (PEC-Werte) kleiner sind als die in Ökotoxizitätstests bestimmten Wirkkonzentrationen (PNEC) – der berechnete Risikoquotient also > 1 ist – kann die Umweltexpositionsabschätzung durch spezifischere Eingabeparame-

23 PEC_{Luft} kann nicht mit dem $PNEC_{Luft}$ verglichen werden, da letzterer in der Regel nicht abgeleitet wird. Oftmals wird der PEC_{Luft} aber benutzt, um während der Abschätzung der indirekten Exposition des Menschen die inhalative Aufnahme eines Stoffes zu berechnen (PEC_{Luft} / $DNEL_{Inhalation}$).

ter eventuell verfeinert werden. Falls die dafür notwendigen spezifischen Eingabeparameter nicht vorliegen, sind eventuell neue Test oder Messungen erforderlich.

Dabei ist es prinzipiell möglich, entweder einen genaueren PEC oder einen genaueren PNEC zu bestimmen, oder aber für beide Größen realistischere Werte zu bestimmen. Wenn neue, zusätzliche Daten generiert werden müssen, sollte dies dem Prinzip folgen, Kosten und Aufwand möglichst gering zu halten bei größtmöglichem Erkenntnisgewinn und der Vermeidung unnötiger Tierversuche.

Die folgenden Möglichkeiten für eine verfeinerte Umweltexpositions- bzw. Risikoabschätzung sollten in Betracht gezogen werden:

- Exakte Informationen über die genaue Anzahl der Emissionstage beim nachgeschalteten Anwender oder dem entsprechenden Branchenverband abfragen.
- Exakte Informationen über die Emissionsfraktionen beim nachgeschalteten Anwender oder dem entsprechenden Branchenverband abfragen.
- Wenn die initiale Emissionsabschätzung zu Konzentrationen im Abwasser gelangt, die die Wasserlöslichkeit des Stoffes überschreiten, sollten die Emissionsfraktionen entsprechend angepasst werden.
- Wenn die Henry Konstante eines Stoffes < 1 Pa·m3/mol ist, kann die Emission in die Luft vernachlässigt werden.
- Die Einführung (zusätzlicher) Risikominderungsmaßnahmen (RMM) sollte in Erwägung gezogen werden, um die Freisetzungen in die Umwelt zu verringern. Dabei muss allerdings darauf geachtet werden, dass die Auswirkungen dieser RMM nicht bereits in den angewandten Emissionsfaktoren eingegangen sind.

Sowohl die Emissionsberechnung als auch die Expositionsabschätzung kann mit Hilfe gemessener Daten wie z.B. Abwasserkonzentrationen oder Monitoring-Daten von Oberflächengewässern weiter verfeinert werden. Dabei sollte allerdings darauf geachtet werden, dass der Stoffsicherheitsbericht ausreichende Informationen darüber enthält, ob die Anwendungsbedingungen und Risikomanagement-Maßnahmen, die im Expositionsszenario beschrieben sind, auch wirklich auf die Bedingungen zutreffen, unter denen die gemessenen Werte bestimmt wurden.

3.2.4.2 Qualitative Risikobeschreibung

Wenn es nicht möglich ist, eine qualitative Risikoabschätzung durchzuführen z.B. wenn kein PEC oder PNEC abgeleitet werden kann, dann sollte zumindest eine qualitative Risikobeschreibung durchgeführt werden. Ein Beispiel dafür ist die qualitative Risikoabschätzung für den Umweltbereicht „Luft“. Eine quantitative Abschätzung durch Bildung eines Risikoquotienten ist hier nicht möglich, da für den Bereich „Luft“ kein PNEC abgeleitet wird.

Für Stoffe, die PBT und vPvB Kriterien erfüllen, ist eine Ermittlung der schädlichen Wirkungen auf die Umwelt gemäß REACH Anhang I Abschnitt 3 und eine Abschätzung der Langzeitexposition von Mensch und Umwelt gemäß REACH Anhang I Abschnitt 5 nicht mit hinreichender Zuverlässigkeit möglich. Daher ist eine gesonderte Ermittlung der PBT und vPvB-Eigenschaften und eine qualitative Risikobeschreibung erforderlich (siehe REACH Leitlinie Kapitel R.11, Abschnitt R.11.2.2.

Für einige Stoffe kann möglicherweise keine umfangreiche qualitative Risikobeschreibung durch Bildung des PEC/PNEC-Risikoquotienten erfolgen, weil es nicht möglich ist einen verlässlichen PNEC für den Umweltbereich Wasser zu bestimmen. Dies kann der Fall sein wenn in den aquatischen Kurzzeittests keine Effekte beobachtet werden. Eine nicht beobachtete Kurzzeittoxizität heißt aber nicht automatisch, dass der Stoff auch keine Langzeittoxizität besitzt. Dies ist oftmals dann der Fall, wenn der Stoff schlecht wasserlöslich und/oder stark hydrophob ist. Für solche Stoffe kann die Testkonzentration im Wasser am Löslichkeitslimit nicht ausreichend hoch sein, um Kurzzeiteffekte auszulösen, da die benötigte Zeit um einen Gleichgewichtszustand zwischen Organismus und Wasser zu erreichen länger ist als die Testdauer. Dies gilt auch für unpolare organische Stoffe mit einem hohen Bioakkumulationspotential.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass für solche Stoffe, die einen log Kow > 3 (oder BCF > 100) haben und deren berechneter PEClokal oder PECregional > 1/100 seiner Wasserlöslichkeit sind, eine qualitative Risikobeschreibung empfohlen wird, um über die Notwendigkeit weiterer Langzeittests zu entscheiden.

Auch in Fällen, in denen der log Kow kein guter Indikator für eine Biokonzentration ist, oder in denen es andere Indikatoren für ein mögliches Biokonzentrationspotential gibt (siehe auch REACH Leitfaden Kapitel R.7.10), sind Fall zu Fall Entscheidungen über mutmaßliche Langzeiteffekte erforderlich.

3.2.5 Softwarewerkzeuge zur Expositionsabschätzung – Stufe 1

Umweltexpositionsabschätzungen einschließlich Freisetzungsabschätzungen, PEC-Berechnungen und auch die abschließende Risikobeschreibung (d.h. die Bildung des Risikoquotienten) können mit dem Softwareprogramm EUSES durchgeführt werden. Alternativ kann das TGD Excel Blatt genutzt werden, welches allerdings derzeit von ECETOC überarbeitet. Es ist die Grundlage für das neue ECETOC TRA Instrument, mit dem ebenfalls eine Umweltexpositionsabschätzung vorgenommen werden kann (siehe unten)[24].

[24] Das TGD Excel Arbeitsblatt ist von ECETOC in Kooperation mit der Radboud University Nijmegen überarbeitet worden. Die überarbeitete Fassung von ECETOC TRA steht seit Herbst 2009 zur Verfügung. Die alte Version des TGD Excel Arbeitsblattes ist nicht mehr aktuell.

EUSES (Version 2.1) sowie das zugehörige Handbuch zum Programm können kostenlos im Internet von der Website http://ecb.jrc.it/euses heruntergeladen und auf dem eigenen Rechner installiert werden.

Für Stufe 1 Abschätzungen, sind die im Anh. 4.3-1 zusammengestellten Informationen als Eingabeparameter gefordert (zusätzliche Informationen können für anorganische Stoffe notwendig sein).

EUSES verfügt über ein implementiertes Modul für eine konservative Emissionsabschätzung. Anstatt diese EUSES Standard-Abschätzung zu nutzen, können auch die Emissionsfaktoren aus den neu definierten Umweltfreisetzungsklassen (environmental release classes; ERC) manuell in EUSES eingegeben werden. Alternativ können die Emissionsfaktoren auch separat mit Hilfe der im REACH Leitlinie Kapitel R.16 vorgegebenen Gleichungen (Gleichungen R.16-1 and R.16-2) berechnet und ebenfalls manuell in EUSES eingegeben werden (siehe Kapitel 3.2.1.2).

Als Ergebnis dieser Expositionsabschätzung der Stufe 1 erhält man die geschätzten Umweltkonzentrationen (PEC-Werte) für die verschiedenen Umweltkompartimente (siehe Anhang 4.3-2). Ein Beispiel für eine Umweltexpositionsabschätzung mit EUSES wird im Anhang 4.3 dargestellt.

Die umweltbezogene Expositionsabschätzung kann auch mit der neuen Fassung von ECETOC TRA durchgeführt werden. Zugang und Dokumentation dieses Instruments werden in der Anlage 4.1-2 in der ersten Zeile genannt. Grundlage des Umweltexpositionsteils von ECETOC TRA ist das EUSES excel – Instrument, das bereits oben beschrieben wurde.

In ECETOC TRA sind Umwelt-Expositionsabschätzungen Teil des sog. „Integrierten Instrumentes“. (Für die Abschätzung der Exposition von Arbeitern gibt es in ECETOC TRA zusätzlich zum integrierten Instrument Module, die unabhängig voneinander benutzt werden können. Die umweltbezogene Abschätzung kann nur im integrierten Instrument vorgenommen werden).

Die neue Fassung von ECETOC TRA (version 2) nutzt dieselben Eingangsgrößen wie EUSES. Sie enthält bereits die neu entwickelten Umweltfreisetzungskategorien (ERCs). Es besteht auch die Möglichkeit, mit spezifischen Umweltfreisetzungs-Kategorien (spERCs) zu arbeiten. ECETOC TRA führt zu denselben Ergebnisgrößen wie EUSES.

Der umweltbezogene Teil von ECETOC TRA besteht aus zwei Modulen: der Abschätzung der Freisetzung und der Berechnung der vorhergesagten Umweltkonzentration (PEC). Das Modul für die Abschätzung der Freisetzung nutzt zu Beginn die Umweltfreisetzungskategorien (siehe Kapitel 9.3, Teil II des Praxisführers). Es bietet vier Alternativen zu den ERCs: spezifische Umweltfreisetzungskategorien, Vorgabewerte aus den A und B Tabellen des früheren Leitfadens (Technical Guidance Document) zur Risikobewertung von Alt- und Neustoffen (http://ecb.jrc.ec.europa.eu/tgd/), Daten aus den OECD Emission Scenario Documents und gemessene Daten (unternehmens-spezifische Emissionsdaten).

Diskussion der Eignung und Einsetzbarkeit

EUSES ermöglicht dem Anwender alle Schritte der Umweltexpositionsabschätzung (einschließlich Emissionsabschätzung und Berücksichtigung von Risikomanagement-Maßnahmen) und auch die abschließende Risikobeschreibung (d.h. die Bildung des Risikoquotienten) mit nur einem Softwarewerkzeug durchzuführen. Für eine erste konservative Stufe-1 Abschätzung sind nur wenige spezifische Eingabeparameter notwendig. Für die restlichen Eingabeparameter sind in dem Programm Standardwerte vorgegeben, die aber überschrieben werden können, wenn stoff- oder prozessspezifische Daten vorliegen.

Allerdings ist es für weniger geübte Anwender nicht so einfach mit der derzeitigen, leicht unübersichtlichen Programmoberfläche von EUSES zu arbeiten. Das betrifft vor allem die Eingabeseiten für die Tonnage und die Anwendungsinformationen. Der Einfluss einzelner Eingabeparameter auf das Endergebnis ist nicht immer klar ersichtlich oder verständlich. Auch ist es nicht leicht nachzuvollziehen, inwieweit Risikomanagement-Maßnahmen (RMM) bereits in den Standard Emissionsfaktoren berücksichtigt sind, so dass die Gefahr besteht, dass dieselben RMM zweifach in die Abschätzung mit eingehen.

Diese Unsicherheiten bezüglich einer Dopplung der RMM waren ein Grund, die neuen Umweltfreisetzungskategorien (Environmental release categories; ERCs) einzuführen. Die ERC bzw. die darin festgelegten Emissionsfaktoren müssen allerdings noch manuell in EUSES eingegeben werden. Darüber hinaus können auch andere vorgegebene Standardwerte mit spezifischen Daten zu Anwendungsbedingungen, RMM, Verteilungs- und Abbauverhalten etc. manuell in EUSES überschrieben werden.

Die von EUSES benutzten Korrelationen zur Ableitung anderer Stoffparameter (wie z.B. Verteilungskoeffizienten) gelten nicht für anorganische Stoffe und für oberflächenaktive Stoffe. Immer wenn gemessene Verteilungs- und Abbaudaten verfügbar sind, sollten sie in den Berechnungen benutzt worden. Dies ist sehr wichtig bei Metallen, anorganischen Stoffen und oberflächenaktiven Stoffen.

Für die Standardwerte, die in EUSES vorgegeben sind, gilt, dass diese immer kritisch geprüft werden sollten, ob sie der spezifischen Situation des Herstellers/Importeurs und/oder nachgeschalteten Anwenders auch wirklich entsprechen. Wenn verlässliche und repräsentative Stoff-, Prozess und/oder Standortdaten vorliegen, sollte diesen auf jeden Fall Vorzug vor den EUSES Standardwerten gegeben werden.

So beträgt z.B. der Standardwert für das Abflussvolumen aus der Kläranlage in EUSES 2.000 m³/Tag. Der Kläranlagenauslauf wird in einen Vorfluter wie z.B. einen Fluss geleitet. Dabei kommt es zu einer Durchmischung des Abwassers mit dem Vorfluter und somit zu einer Konzentrationsverdünnung des betrachteten Stoffes. EUSES nimmt dafür einen Standardverdünnungsfaktor von 10 an. Das heißt, dass die 2.000 m³/Tag aus der Kläranlage eingeleitet werden in einen Fluss, der eine Flussrate von 18.000 m³/Tag hat, so dass das resultierende Gesamtvolumen, auf das die Stoffkonzentration bezogen wird, 20.000 m³/Tag

beträgt. Erfahrungen mit der Textilindustrie haben jedoch gezeigt, dass das Volumen des Vorfluters, in den der Kläranlagenauslauf eingeleitet wird, je nach Standort sehr verschieden sein kann. Da der resultierende Verdünnungsfaktor sehr stark die Umweltkonzentration, also letztlich den PEC-Wert, beeinflusst, sollten daher soweit wie möglich standortspezifische Daten für die Umweltexpositionsabschätzung verwendet werden.

Um einen Bezug zu den Berechnungen herstellen zu können, müssen alle Eingabewerte und Vorgabewerte für die umweltbezogene Expositionsabschätzung dokumentiert werden. EUSES erstellt automatisch einen elektronischen Bericht, der neben den Ergebnissen auch alle Eingabeparameter auflistet.

CHESAR, das ECHA IT Instrument zur Durchführung der Stoffsicherheitsbeurteilung und zur Erstellung des Stoffsicherheitsberichtes, wird auch ein Modul für die umweltbezogene Expositionsabschätzung enthalten. Dieses Modul besteht aus einem speziellen Freisetzungsmodul und dem EUSES Modul für das Verhalten in der Umwelt. Die Vorgabewerte im Freisetzungsmodul stammen aus dem früheren Leitfaden (Technical Guidance Documents) zur Risikobewertung von Alt und Neustoffen (http://ecb.jrc.ec.europa.eu/tgd/)). (CHESAR wird beschrieben im Kapitel 3.5, im Teil I des Praxisführers).

3.2.6 Softwarewerkzeuge zur Expositionsabschätzung – Weitergehende Berechnungen (höhere Stufen)

Berechnungen, die mit EUSES und dem TGD excel Arbeitsblatt durchgeführt wurden, können verbessert werden, indem einige der Eingangsgrößen verfeinert werden.

Sowohl die Emissionsberechnung als auch die Expositionsabschätzung können mit Hilfe gemessener Daten wie z.B. Abwasserkonzentrationen oder Monitoring-Daten von Oberflächengewässern weiter verfeinert werden. Dabei sollte allerdings darauf geachtet werden, dass der Stoffsicherheitsbericht ausreichende Informationen darüber enthält, ob die Verwendungsbedingungen und Risikomanagement-Maßnahmen, die im Expositionsszenario beschrieben sind, auch wirklich auf die Bedingungen zutreffen unter denen die gemessenen Werte bestimmt wurden.

Weiterhin können bei einer weitergehenden Expositionsabschätzung spezifische Abbaudaten des betrachteten Stoffes genutzt werden, um die Eliminierung in der Kläranlage genauer abschätzen zu können.

Ähnlich wie bei EUSES, können auch im umweltbezogenen Teil von ECETOC TRA version 2 weitergehende Berechnungen durchgeführt werden. Hierzu wird mit weiteren und spezifischeren Eingangsgrößen gerechnet.

3.2.7 Weitere Softwarewerkzeuge zur Expositionsabschätzung

Weitere, spezifischere Softwarewerkzeuge zur Expositionsabschätzung gibt es für Stoffe, die wie Pflanzenschutzmittel eingesetzt werden, z.B. Düngemittel, oder für Stoffe, die in Hoch-

see-Anlagen wie z.B. Ölplattformen Verwendung finden. Für diese Stoffe werden die von der FOCUS[25] Gruppe entwickelten Modelle bzw. das CHARM[26] Model als Alternativen zu EUSES empfohlen.

3.3 Scaling (= Abgleich/Anpassung) im Rahmen der Umweltexpositionsabschätzung[27]

Erhält der nachgeschaltete Anwender (downstream user; DU) von seinem Zulieferer ein Expositionsszenario (ES) für einen Stoff, muss er überprüfen, ob seine Verwendung des Stoffes durch das ES abgedeckt wird. Wenn sich aber mehrere seiner Verwendungsbedingungen von den Angaben im ES unterscheiden, ist es nicht immer leicht zu beurteilen, ob seine Verwendung abgedeckt ist. Um diese Prüfung zu erleichtern, sollte der Zulieferer im Expositionsszenario sogenannte Skalierungsregeln oder entsprechende Schätzinstrumente an den nachgeschalteten Anwender kommunizieren, mit denen dieser dann die bestimmenden Größen der Exposition auf seine eigenen Verhältnisse übertragen kann. Scaling und hierfür entwickelte Hilfsmittel werden im Teil I des Praxisführers im Kapitel 7.7 beschrieben.

Dieser Abgleich der Umweltexpositionsabschätzung aus dem Expositionsszenario mit den eigenen Verwendungsbedingungen wird im folgenden Beispiel näher illustriert:

Ein Registrant (Stoffhersteller und/oder Importeur) berechnet die zu erwartende Konzentration seines Stoffes im Oberflächenwasser (PEC_{Wasser}) für die nachfolgend aufgelisteten Anwendungsbedingungen and Risikomanagement-Maßnahmen mit Hilfe der dargestellten Gleichung:

Tägliche Einsatzmenge des Produkts, das den betrachteten Stoff enthält	M_{ES}	1000 kg/Tag
Konzentration des Stoffes im Produkt	C_{ES}	0,1
Emissionsfaktor: Stoffanteil, der während der Verarbeitung/Nutzung ins Abwasser gelangt (ohne Berücksichtigung möglicher RMM)	F_{water}	0,3
Effizienz möglicher RMM, durch die die Emissionen in Luft, Wasser oder Boden reduziert werden	$F_{abatement}$	0,95
Entfernung des Stoffes in Kläranlage	F_{STP}	0,95
Dauer der Emission (Arbeitstage pro Jahr)	$T_{emission}$	200 Tage/Jahr
Kapazität der Kläranlage	Capacity	2000 m^3/Tag
Verdünnungsfaktor im Vorfluter	DILUTION	10

25 FOCUS: Forum for the Co-ordination of pesticide fate models and their USe (http://viso.jrc.it/focus/)

26 https://www.ogp.org.uk/pubs/CHARMManualFeb05.pdf

27 Scaling meint in diesem Zusammenhang die Anwendung relativ einfacher Gleichungen, mit deren Hilfe der nachgeschalteten Anwender zeigen kann, dass seine Verwendung des Stoffes durch die Angaben im Expositionsszenario abgedeckt ist.

$$PEC_{lokal} = PEC_{regional} + \frac{\frac{M_{ES} * C_{ES} * f_{water} * (1 - f_{abatement})}{T_{emission}} * (1 - F_{STP})}{CAPACITY * DILUTION}$$

(siehe auch Beispiel R.16.2 im ECHA Leitlinie Kapitel R.16.2)

Der Registrant berechnet für seine Verwendungsbedingungen einen Risikoquotienten (risk characterisation ratio[28]; RCR_{ES}) für Oberflächengewässer von 0.3. Der Quotient ist < 1 wodurch gezeigt wird, dass die Anwendung unter den gegebenen Bedingungen sicher bzw. das Risiko kontrollierbar ist.

Von den oben aufgelisteten Bedingungen, die die Exposition bestimmen (d.h. den Anwendungsbedingungen and Risikomanagement-Maßnahmen) werden wahrscheinlich die folgenden Größen bei nachgeschalteten Anwendern variieren:

M_{ES}, C_{ES}, f_{water}, $f_{abatement}$, und $T_{emission}$

Es wird davon ausgegangen, dass alle Einflußfaktoren unabhängig voneinander sind und linear zur Exposition der Umwelt beitragen.

Der Registrant schlägt im Expositionsszenario (ES) dem nachgeschalteten Anwender (downstream user ; DU) folgende Gleichung zum Scaling vor:

$$RCR_{DU} = RCR_{ES} * \frac{M_{DU}}{M_{ES}} * \frac{C_{DU}}{C_{ES}} * \frac{f_{water,DU}}{f_{water,ES}} * \frac{(1 - f_{abatement,DU})}{(1 - f_{abatement,ES})} * \frac{T_{emission,ES}}{T_{emission,DU}}$$

Der nachgeschalteten Anwender (DU) benutzt den gleichen Stoff, aber unter anderen Anwendungsbedingungen und mit Einsatz anderer Risikominderungsmaßnahmen:

M_{DU}: 750kg/Tag

C_{DU}: 0,1

$f_{water,\,DU}$: 0,35

$f_{abatement,\,DU}$: 0,98

$T_{emission,\,DU}$: 150 Tage/Jahr

Unter Zuhilfenahme der oben angegebenen Scaling Gleichung kann der nachgeschaltete Anwender prüfen, ob seine Anwendung durch die Angaben im Expositionsszenario abgedeckt ist und ob seine Anwendung sicher ist im Hinblick auf eine Exposition der Umwelt:

[28] Risikoquotient (risk characterisation ration; RCR) = PEC/PNEC

$$RCR_{DU} = RCR_{ES} * \frac{750}{1000} * \frac{0,1}{0,1} * \frac{0,35}{0,3} * \frac{(1-0,98)}{(1-0,95)} * \frac{200}{150} = 0,3 * 0,75 * 1 * 1,17 * 0,4 * 1,3 = \mathbf{0,14}$$

Der berechnete Risikoquotient für die Anwendung des nachgeschalteten Anwenders ist < 1. Das Scaling hat also in diesem Fall gezeigt, dass unter den spezifischen Verwendungsbedingungen des nachgeschalteten Anwenders eine sichere Handhabung des Stoffes möglich ist.

3.4 Literatur

EUSES European Union System for the Evaluation of Substances; Version 2.1 (2008); http://ecb.jrc.ec.europa.eu/euses/

EU TGD 2003 Risk Assessment Spreadsheet Model; http://www.envsci.science.ru.nl/cem-nl/products.html

OECD Chemicals Testing – Guidelines; http://www.oecd.org/department/0,3355,en_2649_34377_1_1_1_1_1,00.html

US EPA OPPT Generic Scenarios; http://www.epa.gov/oppt/exposure

4 Anhänge

4.1 Anhang zu Kapitel 1: Expositionsabschätzung am Arbeitsplatz

Anhang 4.1-1 Beispiele öffentlich verfügbarer Quellen für Messdaten

Quellen	**Daten-qualität***	**Kommentar**
EU Risk Assessment Reports http://ecb.jrc.it/esis/	Hoch	Begrenzte Anzahl Stoffe
BGAA-Report 1/99: Altstoffe – Expositionen am Arbeitsplatz http://www.dguv.de/bgia/de/pub/rep/rep01/bgaa0199/index.jsp	Hoch	Begrenzte Anzahl Stoffe
Environmental Health Criteria http://www.inchem.org/pages/ehc.html	Niedrig	Begrenzte Anzahl Stoffe
SIDS – "Screening Information Data Sets" und/oder SIDS Initial Assessment Reports (SIAR) http://www.chem.unep.ch/irptc/sids/oecdsids/indexcasnumb.htm	Niedrig	Begrenzte Anzahl Stoffe
CICAD – "Concise International Chemical Assessment Documents" http://www.inchem.org/pages/cicads.html	Niedrig	Begrenzte Anzahl Stoffe

** Datenqualität:*

Hoch: Die Daten erfüllen wahrscheinlich die meisten Kriterien der Expositionsabschätzung und können ausreichend sein, um alleine verwendet zu werden.

Niedrig: Die Daten erfüllen wahrscheinlich einige der Kriterien der Expositionsabschätzung, sind aber vermutlich unzureichend, um alleine verwendet zu werden.

Anhang 4.1-2 Übersicht über Instrumente der Stufe 1 und höherer Stufe

Stufe	Instrument	Expositionspfad	Quellen	Status
1	ECETOC TRA	Inhalative und dermale Exposition: quantitative Schätzungen (einzelne Punktwerte)	Internet: https://www.ecetoc-tra.org (Registrierung erforderlich). Instrument (MS Excel® Arbeitsblatt) und Anleitung. Druckfassung: ECETOC 2004, ECETOC 2009TR.	Neue Version veröffentlicht April 2010
	EMKG	Nur inhalative Exposition “Banding”-Ansatz	MS Excel®-Version verfügbar unter: http://www.reach-helpdesk.de/en/Exposure/Exposure.html?__nnn=true Druckfassung: Packroff et al., 2006 (zum EMKG allgemein, spricht die neue MS Excel®-Version nicht an)	Unbekannt
Höhere Stufen	RISKOFDERM calculator	Nur dermale Exposition: quantitative Schätzungen (Median und Perzentile)	Calculator (MS Excel® spreadsheet) verfügbar unter: http://www.tno.nl/content.cfm?&context=markten&content=product&laag1=177&laag2=333&item_id=1155&Taal=2 Ein Leitlinie kann von derselben Website heruntergeladen werden. Druckfassung: z.B. Marquart et al., 2006 ; Warren et al., 2006	Version 2.1
	Stoffenmanager	Quantitative Schätzungen derzeit nur für inhalative Exposition	Internet: https://www.stoffenmanager.nl/ (Registrierung erforderlich) Berichterstellung und REACH-bezogene Ausgabe derzeit nur auf Holländisch Kurzer online-Leitlinie unter: https://www.stoffenmanager.nl/Public/Explanation.aspx Druckfassung: Marquart et al., 2008; Tielemans et al., 2008	Version 3.5 (Juni 2006), version 4.0 jetzt verfügbar

Für die Expositionsabschätzung von Metallen und anorganischen Verbindungen ist ein eigenes Instrument entwickelt worden: „MEASE“ (es ist im Internet verfügbar unter: http://www.ebrc.de/ebrc/ebrc-mease.php). Grundlagen dieses Instruments sind zum einen das Expositionsabschätzungs-Modell EASE (verfügbar unter http://www.hse.gov.uk/research/rrhtm/rr136.htm), zum anderen einige gemessene Daten (siehe hierzu auch Kapitel 1.2.5)).

Anhang 4.1-3 Benötigte Eingangsinformationen für Instrumente der Stufe 1: Expositionsabschätzung am Arbeitsplatz.

Parameter	**Erforderlich in**		**Verfügbarkeit**
	ECETOC TRA[5]	**EMKG**	
Aggregatzustand: Stoff			Stoffspezifische Daten
Aggregatzustand: Produkt			Produktspezifische Daten
Betriebstemperatur (Flüssigkeiten)	☑[5]	☑[5]	ES-spezifisch
Dampfdruck (Flüssigkeiten)	☑	☑	Stoffspezifische Daten
Siedepunkt (Flüssigkeiten)		☑	Stoffspezifische Daten
Staubungsverhalten (Feststoffe)	☑	☑	SDS/stoff-/produktspezifische Daten sowie Tables R.14-2 und R.14-8 in ECHA CSA 2008 (Kapitel R.14)
Dauer der Tätigkeit	☑[1]	☑[1]	ES-spezifisch, aber nur elementare Daten erforderlich
Menge des verwendeten Stoffes /des verwendeten Produkts		☑[2]	ES-spezifisch, aber nur elementare Daten erforderlich
Angaben zur Verwendung	☑[3]	☑[3]	ES-spezifisch, aber nur elementare Daten erforderlich
Angaben zu RMM	☑[4]	☑[4]	ES-spezifisch, aber nur elementare Daten erforderlich
Bezugswerte (z.B. DNELs)	optional		

Anmerkungen:

Stoffspezifische Daten sollten für gewöhnlich im Rahmen des Registrierungsprozesses verfügbar sein, d.h. diese Daten sind auch für den IUCLID5-Datensatz erforderlich.

Produktspezifische Daten sollten in der Regel zur Verfügung stehen

1 *Vier Bänder zur Dauer der Tätigkeit und Berücksichtigung einer nur kurzzeitigen Exposition: Tätigkeit < 15 Min. während einer 8h-Schicht? (ja/nein) in EMKG*

2 *Es sind nur Angaben zur Größenordnung erforderlich: "small", „medium" oder „large" sowie für Flüssigkeiten, wenn mehr als 1 L/Schicht auf Oberflächen ausgebracht wird.*

3 *Nur Angaben zur Ausbringung auf Oberflächen > 1m2 (ja/nein) sind erforderlich in EMKG. In ECETOC TRA werden mehr Informationen benötigt (Innen-/Aussenanwendung, Verwendung in Gemischen mit Konzentrationsangaben, industrielle oder gewerbliche Verwendung).*

4 *Lokale Absaugung (LEV) ja/nein und Atemschutz (nein, 90% Schutz oder 95% Schutz) in ECETOC TRA, drei verschiedene Optione im EMKG: allgemeine Lüftung ("general ventilation"), technische Maßnahmen („engineering controls") (z.B. örtliche Absaugung) oder Einkapselung („containment").*

5 *Die Prozesstemperatur muss bekannt sein, da die Flüchtigkeit bei der Prozesstemperatur beurteilt wird.*

Anhang 4.1-4 Benötigte Eingangsinformationen für Instrumente höherer Stufe: Expositionsabschätzung am Arbeitsplatz

Parameter	Erforderlich in		Verfügbarkeit
	Stoffen-manager	RISKOFDERM calculator[1]	
Stoffinformationen			
CAS-Nummer	☑		Stoffspezifische Daten
Aggregatzustand			
Dampfdruck	☑		Stoffspezifische Daten
Molekulargewicht	☑		Stoffspezifische Daten
Prozentualer Anteil im Produkt	☑		SDS
Produktinformationen			
Aggregatzustand	☑		SDS
Dampfdruck (Flüssigkeiten)	☑		SDS
Staubungsverhalten (Feststoffe)	☑		SDS/Stoff-/produktspezifische Daten sowie Tabellen R.14-2 und R.14-8 in ECHA CSA 2008 (Kapitel R.14)
Viskosität		☑	Produktspezifische Daten
Verdünnung mit Wasser	☑		ES
Kontamination von Objekten mit Produkt	☑		ES
R- und S-Sätze	☑		SDS
Applikationsrate [L/min]		☑	Produktspezifische Daten, kann auch vom ES abhängen
Weitere Informationen			
Grad der Einkapselung	☑		ES
Angaben zur Lüftung	☑		ES
Angaben zu Schutzmaßnahmen	☑		ES
Dauer der Tätigkeit/Anwendung	☑		ES
Häufigkeit der Tätigkeit/Anwendung	☑		ES
Angaben zur Verwendung/Anwendung	☑		ES
Abstand Arbeiter-Quelle	☑		ES
Weitere detaillierte Informationen	☑		ES
Exponierte Körperteile	☑		ES
Raumvolumen	☑		ES
Ausbringrichtung		☑	ES
Grifflänge des Werkzeugs		☑	ES

Anmerkungen:

Stoffspezifische Daten sollten für gewöhnlich im Rahmen des Registrierungsprozesses verfügbar sein, d.h. diese Daten sind auch für den IUCLID5-Datensatz erforderlich.

Produktspezifische Daten sollten in der Regel zur Verfügung stehen

ES: Angaben zu diesen Parametern können im Expositionsszenario zur Verfügung stehen

[1] Beispielhaft für den Prozess: Verteilung des Produkts mit einem tragbaren Werkzeug ("Dispersion hand-held tools", DEO unit 3); die Anforderungen unterscheiden sich bei anderen Prozessen

4.2 Anhang zu Kapitel 2: Expositionsabschätzung Verbraucher

4.2.1 Default-Werte

Körpergewicht

Das Körpergewicht kann für männliche Erwachsene zu 70 kg und für weibliche Erwachsene zu 60 kg angenommen werden (s. auch Appendix R.15-4 („Data references“) in ECHA CSA 2008). Bremmer et al. (2006) leiten leicht unterschiedliche Werte von 74 kg für Männer und 61 kg für Frauen ab, wobei 65 kg als Default-Wert für Erwachsene im Allgemeinen in der ConsExpo-Software verwendet wird (für Einzelheiten s. Abschnitt 2.2.2). ConsExpo verwendet in einem spezifischen Szenario für Schädlingsbekämpfungsmittel („post-application“) ein Default-Körpergewicht von 8,69 kg für Kinder (Alter: 10,5 Monate). Default-Körpergewichte für Kinder verschiedener Altersgruppen sind in Bremmer et al. (2006) angegeben.

Hautoberfläche

Appendix R.15-4 (“Data references”) in ECHA CSA 2008 enthält detaillierte Daten zur Hautoberfläche von Männern und Frauen. Die folgende Tabelle fasst die Werte für einige Körperteile und die gesamte Hautoberfläche zusammen (Mittel der Werte für Männer und Frauen). Werte für andere Körperteile, Daten zur Gesamt-Hautoberfläche bei Kindern oder geschlechtsspezifische Werte können Appendix R.15-4 in ECHA CSA 2008 entnommen werden. Wenn detailliertere Angaben benötigt werden, z.B. Angaben für bestimmte Körperteile bei Kindern, bilden die in Appendix R.15-4 in ECHA CSA 2008 zitierten Quellen einen guten Ausgangspunkt.

Anhang 4.2-1 Hautoberflächen bei Erwachsenen (Quelle: ECHA CSA 2008 R15-4)

Körperteil	**Hautoberfläche (in cm^2) für Erwachsene**
Arme	2132
Unterarme	1337
Hände (Ober- und Unterseite)	786
Gesamt	**18150**

Raumvolumen

Appendix R.15-4 (“Data references”) in ECHA CSA 2008 stellt Daten zum Volumen verschiedener Raumtypen in den Niederlanden (25. Perzentile), mit einigen Zusatzangaben aus Deutschland (kein “worst case“) bereit.

Anhang 4.2-2 Default-Werte für verschiedene Raumvolumina (Quelle: ECHA CSA 2008 R15-4)

Raumtyp	**Raumvolumen (in m^3)**
Wohnzimmer	58 (64 bei deutschen Daten)
Nicht spezifizierter Raum	30 und 40 (43 für Kinderzimmer bei deutschen Daten)
Schlafzimmer	16
Küche	15
Toilette	2.5
Badezimmer	10*

** Ein Wert von 4 m^3 wird in Appendix R.15-4 ("Data references") in ECHA CSA 2008 angegeben. Die jüngste Version der Quelle (das ConsExpo "General Fact Sheet; Bremmer et al. 2006) enthält den hier verwendeten Wert, der auch als sinnvoller angesehen wird.*

Wenn detailliertere Angaben benötigt werden, bildet der Bericht von Bremmer et al. (2006) einen guten Ausgangspunkt mit einigen zusätzlichen Werten.

4.3 Anhang zu Kapitel 3: Umweltexpositionsabschätzung

Anhang 4.3-1 Benötigte Eingangsinformationen für Stufe 1 Abschätzungen der Verteilung in der Umwelt

Parameter	**Beschreibung**	**Verfügbarkeit/Quelle**
MOLW	Molekulargewicht	Technisches Dossier – Kapitel 2
MP	Schmelzpunkt	Technisches Dossier – Kapitel 7
BP	Siedepunkt	Technisches Dossier – Kapitel 7
VP	Dampfdruck	Technisches Dossier – Kapitel 7
SOL	Wasserlöslichkeit	Technisches Dossier – Kapitel 7
KOW	Oktanol-Wasser Verteilungskoeffizient	Technisches Dossier – Kapitel 7 (nicht für anorganische Stoffe)
Kpsoil	Boden-Wasser Verteilungskoeffizient. EUSES berechnet diesen Parameter auf Basis des KOW. Für anorganische Stoffe sollte Kpsoil aber direkt gemessen werden, da andere Sorptions-Mechanismen wie z.B. Adsorption an mineralische Oberflächen eine wichtige Rolle spielen.	Technisches Dossier –Adsorption-Desorption Screening – Kapitel 9 Siehe auch Kapitel R.16.4.3.3
Kpsed	Sediment-Wasser Verteilungskoeffizient. EUSES berechnet diesen Parameter auf Basis des KOW. Für anorganische Stoffe sollte Kpsed aber direkt gemessen werden, da andere Sorptions-Mechanismen wie z.B. Adsorption an mineralische Oberflächen eine wichtige Rolle spielen.	Technisches Dossier –Adsorption-Desorption Screening – Kapitel 9 Siehe auch Kapitel R.16.4.3.3
Kpsusp	Partikel-Wasser Verteilungskoeffizient. EUSES berechnet diesen Parameter auf Basis des KOW. Für anorganische Stoffe sollte Kpsusp aber direkt gemessen werden, da andere Sorptions-Mechanismen wie z.B. Adsorption an mineralische Oberflächen eine wichtige Rolle spielen.	Technisches Dossier –Adsorption-Desorption Screening – Kapitel 9 Siehe auch Kapitel R.16.4.3.3

Parameter	Beschreibung	Verfügbarkeit/Quelle
Biode-gradability	Ergebnis der Bioabbaubarkeits-Tests. Nicht relevant für anorganische Stoffe.	Technisches Dossier – Kapitel 9 Siehe auch Kapitel R.16.4.4.4, R.16.4.4.5, R.16.4.4.7
Ej,local	Lokale Emission in das Kompartiment j (j: Wasser, Luft, Boden).	Emissionsabschätzung basierend auf dem Anwendungsszenario. Siehe auch Kapitel R.16.2
Eij,regional	Regionale Emission von der Quelle i in das Kompartiment j (j: Wasser, Luft, Boden).	Emissionsabschätzung basierend auf dem Anwendungsszenario. Siehe auch Kapitel R.16.2

Anhang 4.3-2 Ergebnisse der EUSES Berechnung: Umweltkonzentrationen in verschiedenen Kompartimenten (Predicted environmental concentrations – PECs)

PEC	Parameter	Zweck / weitere Verwendung
PECstp	Konzentration im Belüftungsbecken der Kläranlage	Abschätzung, ob der Stoff den biologischen Abbau in der Kläranlage hemmt
PEClocal.air,ann	Jährliche Durchschnittskonzentration (lokal) in der Luft	–
PEClocal.water	Konzentration im Oberflächenwasser (lokal, während der Emissionsperiode)	Risikoabschätzung für Süsswasser
PEClocal.water,ann	Jährliche Durchschnittskonzentration (lokal) im Oberflächenwasser	Sekundärvergiftungen
PEClocal.water,marine	Konzentration in Meeresgewässern (während der Emissionsperiode)	Risikoabschätzung für Salzwasser
PEClocal.water,ann,marine	Jährliche Durchschnittskonzentration (lokal) in Meeresgewässern	Sekundärvergiftungen
PEClocal.sed	Konzentration in Sedimenten von Oberflächenwasser (lokal)	Risikoabschätzung für Süsswasser; Sekundärvergiftungen
PEClocal.sed,marine	Konzentration in marinen Sedimenten (lokal)	Risikoabschätzung für Salzwasser
PEClocal.agric,30	Konzentration in landwirtschaftlich genutzten Böden (lokal) – gemittelt über 30 Tage	Risikoabschätzung für Landökosysteme
PEClocal.agric,180	Konzentration in landwirtschaftlich genutzten Böden (lokal) – gemittelt über 180 Tage (zur Berechnung von Konzentrationen in Feldfrüchten)	Sekundärvergiftungen; Indirekte Human-Exposition
PEClocal.grass,180	Konzentration in Böden unter Grünflachen – gemittelt über 180 Tage	Sekundärvergiftungen; Indirekte Human-Exposition
PECreg.water,tot	Konzentration im Oberflächenwasser (regional)	Risikoabschätzung für Süsswasser; Sekundärvergiftungen; Indirekte Human-Exposition
PECreg.seawater,tot	Konzentration in Meeresgewässern (regional)	Risikoabschätzung für Salzwasser; Sekundärvergiftungen; Indirekte Human-Exposition
PECreg.air	Konzentration in der Luft (regional)	–

PEC	Parameter	Zweck / weitere Verwendung
PECreg.agric	Konzentration in landwirtschaftlich genutzten Böden (regional)	Risikoabschätzung für Landökosysteme; Sekundärvergiftungen; Indirekte Human-Exposition
PECreg.natural	Konzentration in ungenutzten Böden (regional)	Risikoabschätzung für Landökosysteme Sekundärvergiftungen
PECreg.ind	Konzentration in industriell genutzten Böden (regional)	–
PECreg.sed	Konzentration in Sedimenten von Oberflächenwasser (regional)	Risikoabschätzung für Süsswasser
PECreg.seased	Konzentration in marinen Sedimenten (regional)	Risikoabschätzung für Salzwasser

Anhang 4.3-3 Beispiel einer Berechnung der Umweltexposition mit Hilfe von EUSES (Quelle: RIP 3.2.2 REFERENCE TGD – PART D)

Tier 1 assessment

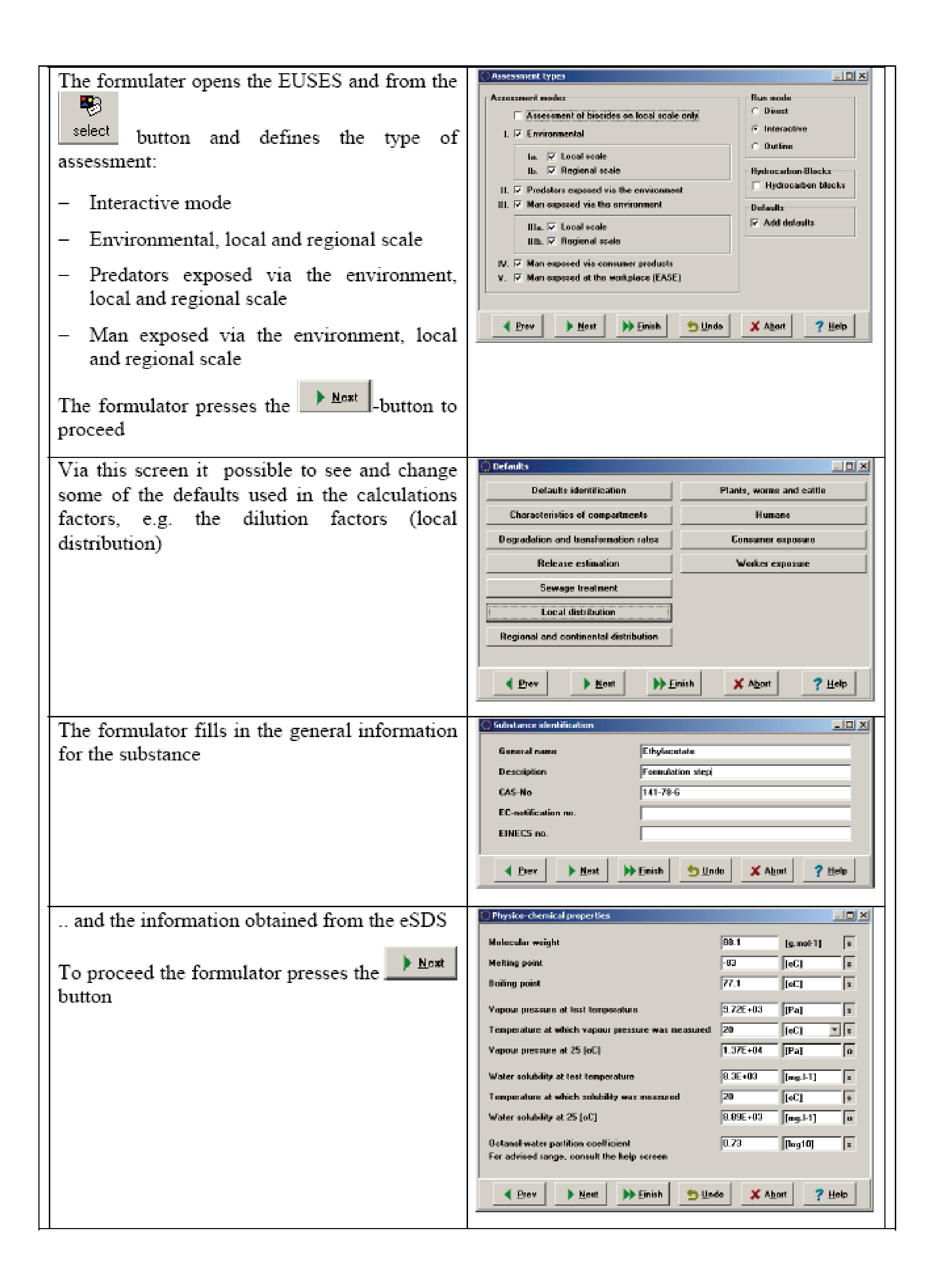
A paint formulator produces a decorative paint. Ethylacetate is present in the paint at a concentration of 5%. The formulator has obtained the following information via the eSDS for etahylacetate, which was obtained from the supplier:

Molar mass	g/mol	88.1
LogKow	-	0.73
Vapour Pressure at 20oC	Pa	9720
Water solubility at 20oC	mg/L	8300
Biodegradability	-	Readily biodegradable
Melting point	K	-83
Boiling point	K	77.1
Half-life in air	d	8.45
PNEC water	µg/L	96.5
PNEC air	mg/m^3	Not determined
PNEC sediment	mg/kg ww	0.1
PNEC soil	mg/kg ww	0.05
PEC regional, supply chain	µg/L	<<0.1

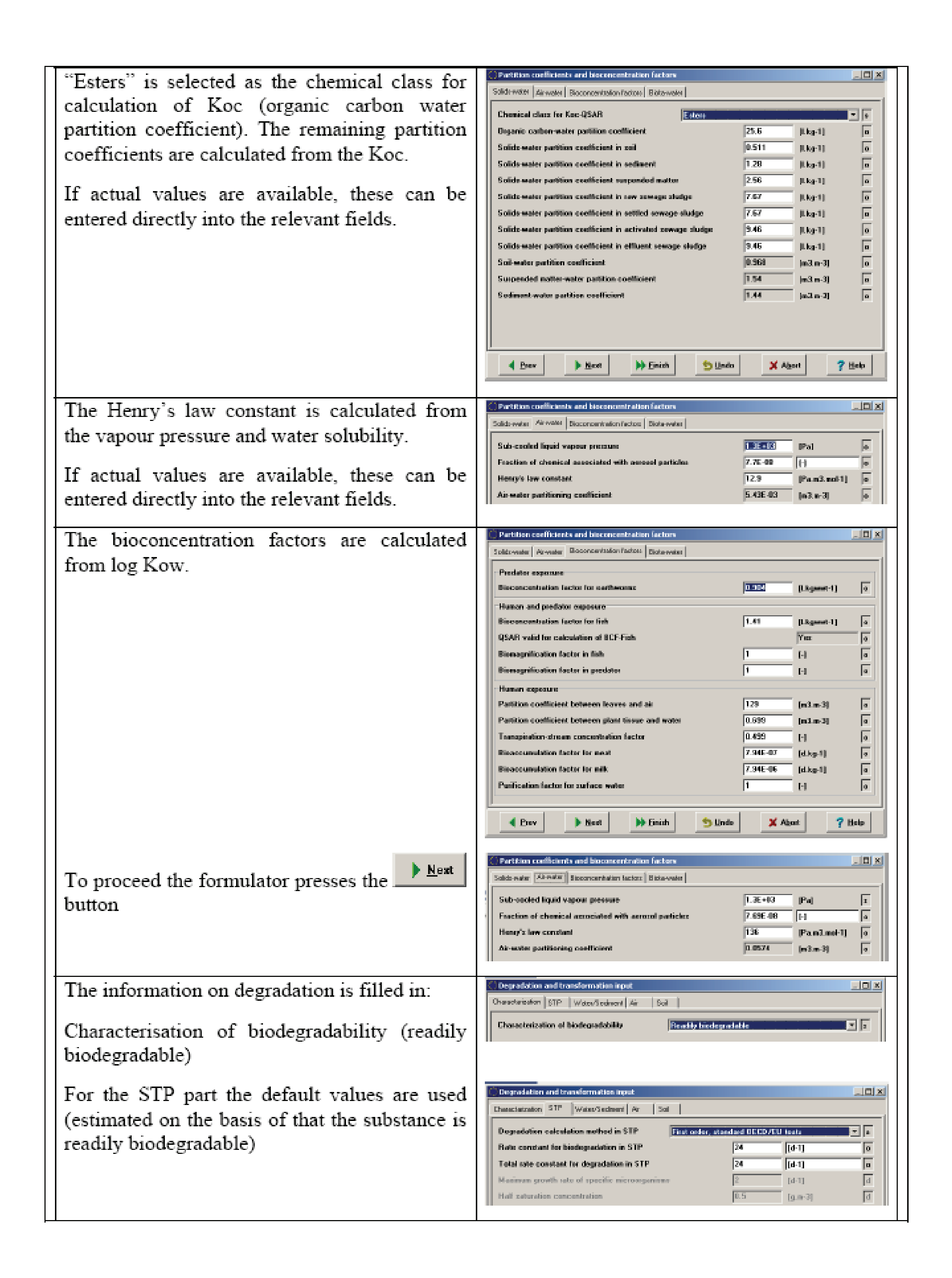
The paint formulator knows that at maximum 5% of the raw material ends in wastewater, which is discharged to a municipal STP. It is estimated that 5% of the consumption is released to the air on the basis of VOC emissions.

The formulator uses approx. 400 kg/d of ethylacetate, or 80 approx. tonnes/yr as the production runs 200 days per year.

In order to assess if the use of ethylacetate is environmentally safe the formulator performs an EUSES calculation.



The formulater opens the EUSES and from the [select] button and defines the type of assessment: – Interactive mode – Environmental, local and regional scale – Predators exposed via the environment, local and regional scale – Man exposed via the environment, local and regional scale The formulator presses the [Next]-button to proceed	Assessment types Assessment modes: Assessment of biocides on local scale only; I. Environmental; Ia. Local scale; Ib. Regional scale; II. Predators exposed via the environment; III. Man exposed via the environment; IIIa. Local scale; IIIb. Regional scale; IV. Man exposed via consumer products; V. Man exposed at the workplace (EASE) Run mode: Direct; Interactive; Outline Hydrocarbon-Blocks: Hydrocarbon blocks Defaults: Add defaults Prev · Next · Finish · Undo · Abort · Help
Via this screen it possible to see and change some of the defaults used in the calculations factors, e.g. the dilution factors (local distribution)	Defaults Defaults identification; Characteristics of compartments; Degradation and transformation rates; Release estimation; Sewage treatment; Local distribution; Regional and continental distribution; Plants, worms and cattle; Humans; Consumer exposure; Worker exposure Prev · Next · Finish · Abort · Help
The formulator fills in the general information for the substance	Substance identification General name: Ethylacetate Description: Formulation step CAS-No: 141-78-6 EC-notification no.: EINECS no.: Prev · Next · Finish · Undo · Abort · Help
.. and the information obtained from the eSDS To proceed the formulator presses the [Next] button	Physico-chemical properties Molecular weight: 88.1 [g.mol-1] Melting point: -83 [oC] Boiling point: 77.1 [oC] Vapour pressure at test temperature: 9.72E+03 [Pa] Temperature at which vapour pressure was measured: 20 [oC] Vapour pressure at 25 [oC]: 1.37E+04 [Pa] Water solubility at test temperature: 8.3E+03 [mg.l-1] Temperature at which solubility was measured: 20 [oC] Water solubility at 25 [oC]: 8.89E+03 [mg.l-1] Octanol-water partition coefficient: 0.73 [log10] For advised range, consult the help screen Prev · Next · Finish · Undo · Abort · Help



“Esters” is selected as the chemical class for calculation of Koc (organic carbon water partition coefficient). The remaining partition coefficients are calculated from the Koc.

If actual values are available, these can be entered directly into the relevant fields.

The Henry’s law constant is calculated from the vapour pressure and water solubility.

If actual values are available, these can be entered directly into the relevant fields.

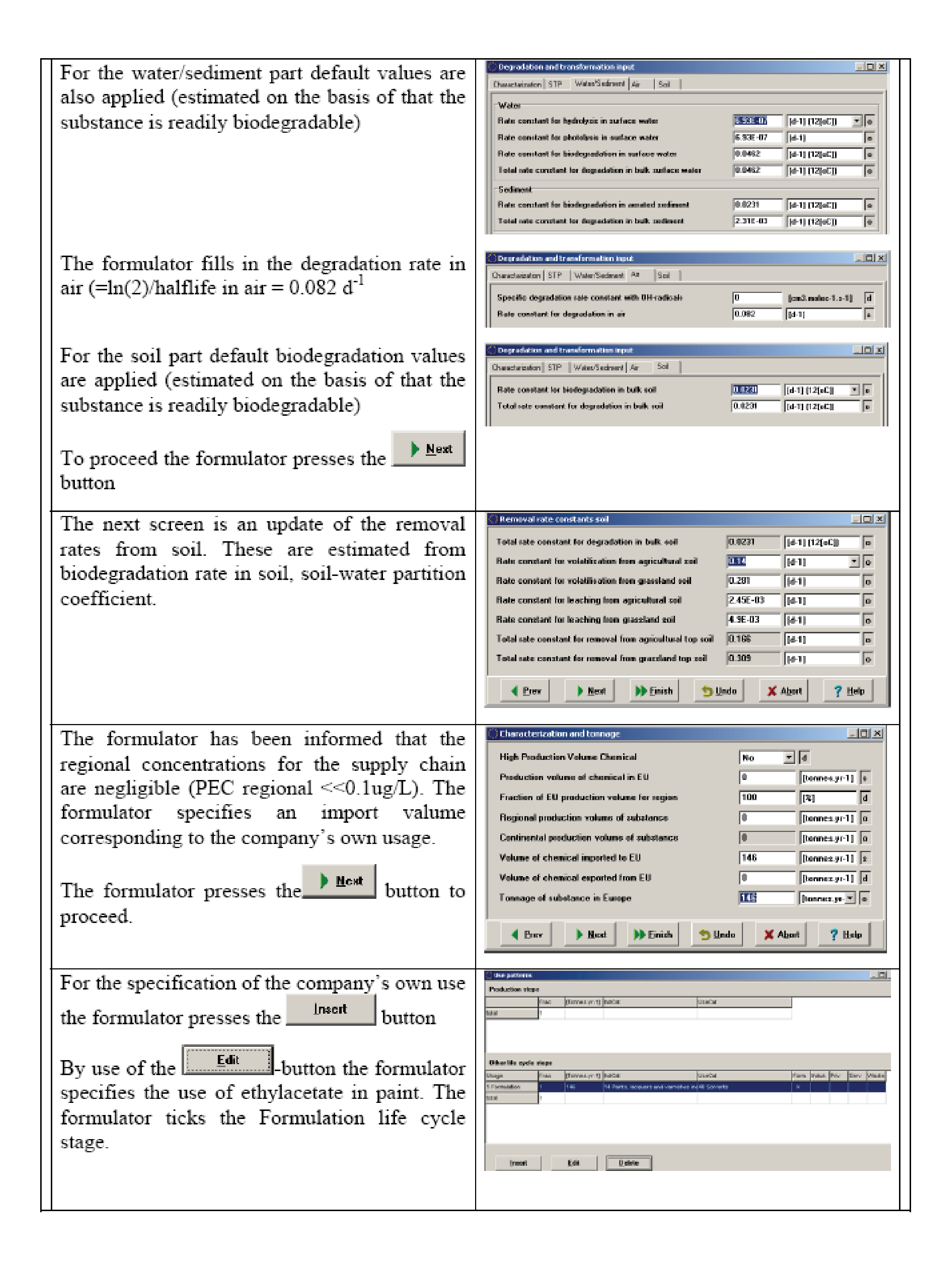
The bioconcentration factors are calculated from log Kow.

To proceed the formulator presses the Next button

The information on degradation is filled in:

Characterisation of biodegradability (readily biodegradable)

For the STP part the default values are used (estimated on the basis of that the substance is readily biodegradable)



For the water/sediment part default values are also applied (estimated on the basis of that the substance is readily biodegradable)

The formulator fills in the degradation rate in air (=ln(2)/halflife in air = 0.082 d^{-1}

For the soil part default biodegradation values are applied (estimated on the basis of that the substance is readily biodegradable)

To proceed the formulator presses the Next button

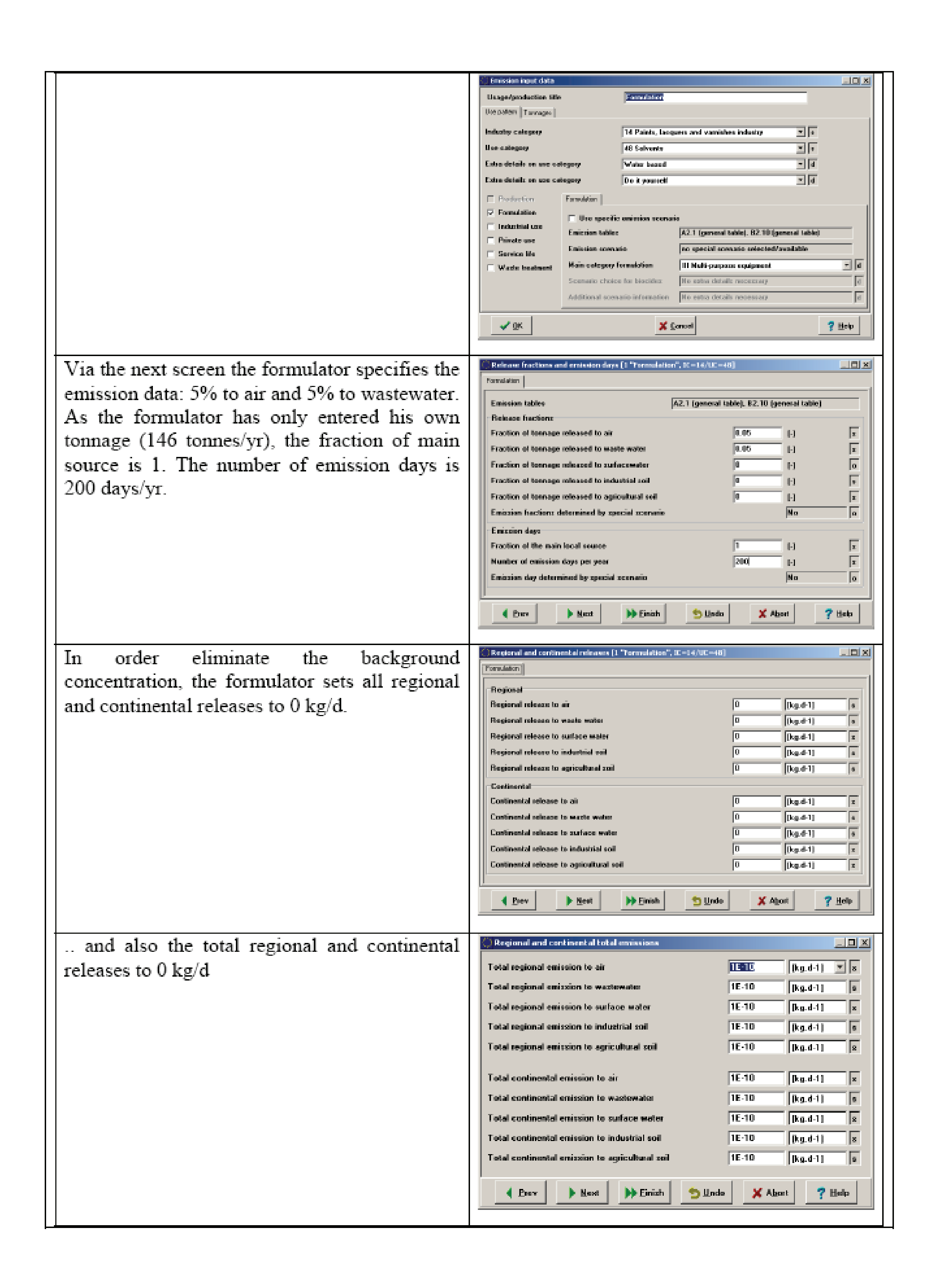
The next screen is an update of the removal rates from soil. These are estimated from biodegradation rate in soil, soil-water partition coefficient.

The formulator has been informed that the regional concentrations for the supply chain are negligible (PEC regional <<0.1ug/L). The formulator specifies an import valume corresponding to the company's own usage.

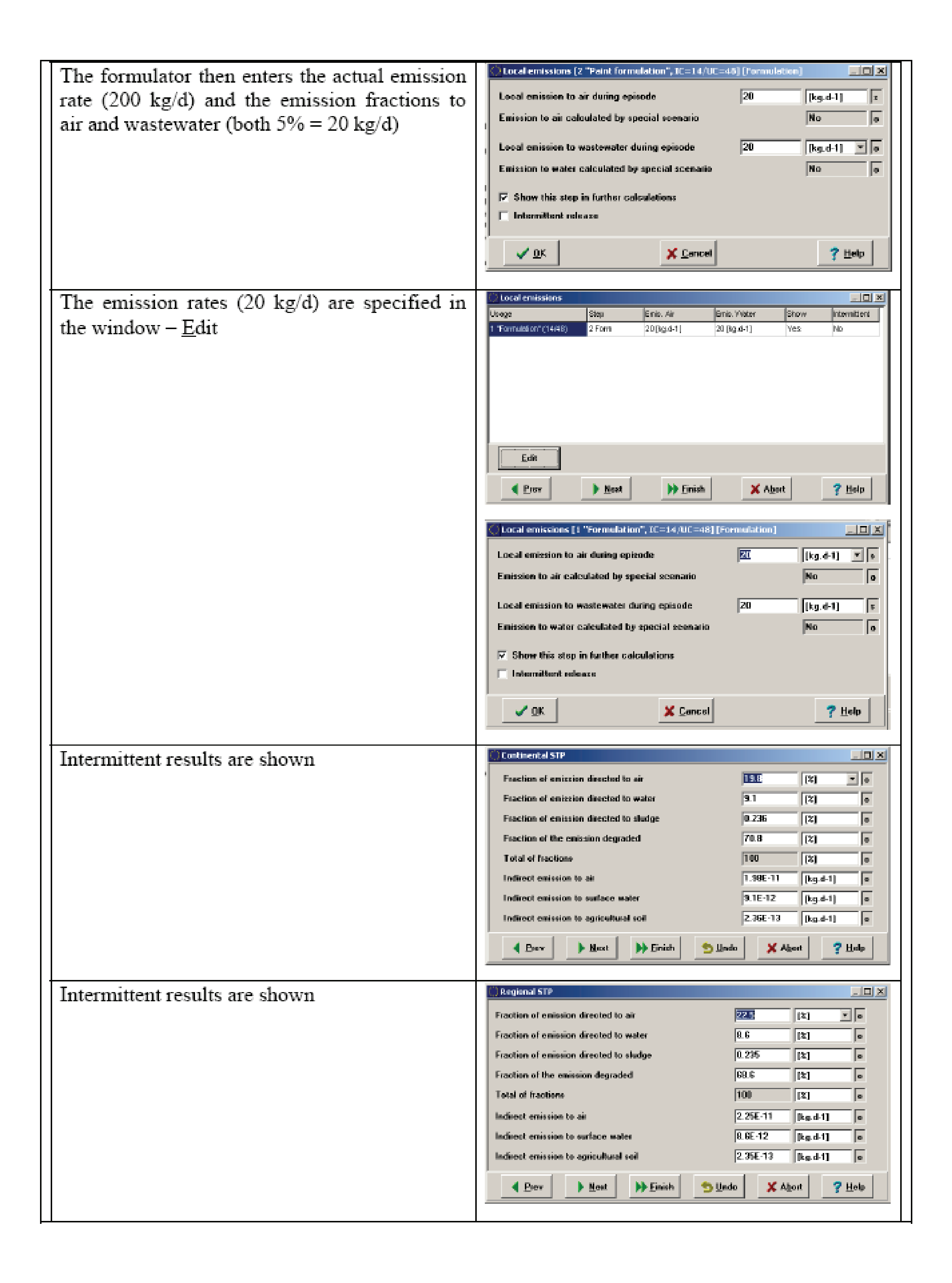
The formulator presses the Next button to proceed.

For the specification of the company's own use the formulator presses the Insert button

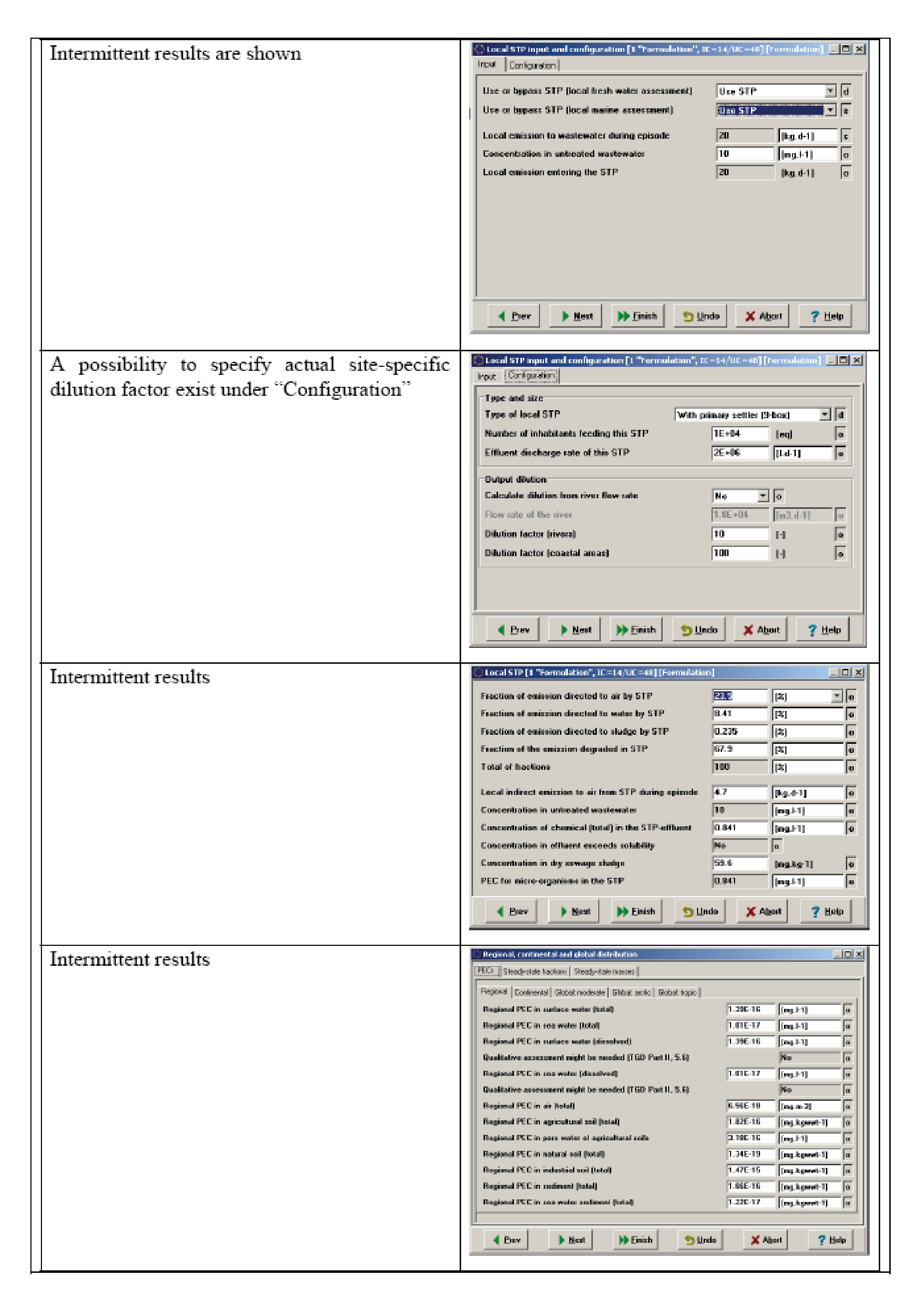
By use of the Edit -button the formulator specifies the use of ethylacetate in paint. The formulator ticks the Formulation life cycle stage.



Via the next screen the formulator specifies the emission data: 5% to air and 5% to wastewater. As the formulator has only entered his own tonnage (146 tonnes/yr), the fraction of main source is 1. The number of emission days is 200 days/yr.	
In order eliminate the background concentration, the formulator sets all regional and continental releases to 0 kg/d.	
.. and also the total regional and continental releases to 0 kg/d	



The formulator then enters the actual emission rate (200 kg/d) and the emission fractions to air and wastewater (both 5% = 20 kg/d)	
The emission rates (20 kg/d) are specified in the window – Edit	
Intermittent results are shown	
Intermittent results are shown	



Intermittent results are shown	
A possibility to specify actual site-specific dilution factor exist under "Configuration"	
Intermittent results	
Intermittent results	

Fresh water

The concentration in water is estimated at 0.0841 mg/L. The Risk Characterisation Ratio (RCR) for surface water is then 0.0841/0.0965 = 0.9, i.e. below 1.

Sediment

The concentration in sediment = 0.113 mg/kg ww.

The Risk Characterisation Ratio (RCR) for sediment is then 0.113/0.1 = 1.

Soil

The concentration in soil (30 d. average) = 0.0175 mg/kg ww.

The Risk Characterisation Ratio (RCR) for soil is then 0.0175/0.05 = 0.4, i.e. below 1.

Even though the RCR for sediment is very close to 1, safe use is demonstrated. DISKUSSION – RCR >1

